

ESTUDIO TEÓRICO-EXPERIMENTAL DE LA 7-METOXI-3,5,5'- TRIHIDROXIFLAVANONA (BLUMEATIN)

Lagoria, K. Luciana¹; Ferraresi Curotto Verónica^{2,3}; Arjona, Mila¹

¹FACEyN, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales – UNCa, K4700AAP, Catamarca, Argentina

²CIFTA, Centro de investigaciones fisicoquímicas, teoricas y Aplicadas - Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - UNCa

³CEQUINOR, Departamanto de Quimica y Facultad de ingenieria (CONICET – UNLP), B1900AVV, La Plata, Argentina.

vferraresi@conicet.gov.ar - milarj2002@yahoo.com.ar

RESUMEN

Los flavonoides constituyen una de las más intrigantes familias de compuestos naturales debido a sus múltiples actividades farmacológicas. Consisten en un esqueleto carbonado C6-C3-C6, donde los componentes C6 son anillos aromáticos unidos por tres átomos de carbono que pueden formar o no un tercer anillo pirano o pirona.

En este trabajo abordamos, con herramientas de Química Computacional, el estudio del flavonoide 7-metoxi-3,5,5'-trihydroxiflavanona (blumeatin). Se realizó un barrido del espacio conformacional y se determinaron las propiedades estructurales, vibracionales y corrimientos magnéticos de los confórmeros más estables, comparándolas con datos experimentales. Asimismo, se determinaron los índices de reactividad derivados de teoría del funcional de la densidad y las distribuciones de carga correspondientes.

El espacio conformacional de la molécula fue estudiado por medio de simulaciones de dinámica molecular a 600 K utilizando el método semiempírico AM1 como campo de fuerzas, disponible en el programa MolDynSP. Como resultado de la simulación se obtuvo un conjunto de veinte conformaciones que fueron optimizadas con el método AM1. Posteriormente, la geometría de los confórmeros más estables fue nuevamente optimizada con herramientas de la Teoría del Funcional de la Densidad, usando el funcional de intercambio y correlación B3LYP con funciones base

6-31+G**, disponibles en el programa Gaussian 09. El mismo paquete de programas se usó para la obtención de frecuencias vibracionales, corrimientos magnéticos y distribuciones de cargas. Los descriptores de reactividad se calcularon según el teorema de Koopman. El análisis vibracional de cada geometría optimizada se llevó a cabo con el mismo nivel de teoría, mientras que el cálculo de los corrimientos magnéticos se realizó a nivel B3LYP/6-311++G(2d,p).