

XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

ESTUDIO CONFORMACIONAL DE PEONIDINA, PETUNIDINA Y MALVIDINA: ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE Y ANTIMUTAGÉNICA EN VACÍO Y SOLVENTES

Szewczuk Nicolas A.¹, Duchowicz Pablo R.¹ y Pomilio Alicia B.².

¹Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) – Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.²Laboratorio de Química y Bioquímica Estructural, Departamento de Bioquímica Clínica, Área Hematología, Hospital de Clínicas “José de San Martín”, Universidad de Buenos Aires, Av. Córdoba 2351, C1120AAF Buenos Aires, Argentina.

nicoszewczuk@gmail.com

Introducción

Las antocianinas son pigmentos hidrosolubles naturales de frutos, hojas, flores, tallos y tubérculos, pertenecientes a la familia de los flavonoides. Estructuralmente, son O-glicósidos de las antocianidinas (agliconas), siendo sales de flavilio, también llamadas sales de oxonio, representadas por una carga positiva en O-1.

Se realizó un análisis exhaustivo del espacio conformacional de las tres antocianidinas metoxiladas más abundantes en la naturaleza: peonidina, petunidina y malvidina. Estas estructuras se vincularon además con actividades biológicas de interés, como las actividades antioxidantes y antimutagénicas. Se analizaron conformeros planares (P) y no planares (Z) tanto en vacío como en varios solventes, incluyendo ácido acético, metanol y agua, utilizando el nivel teórico B3LYP/6-311++G**.

Resultados

Se identificaron treinta y cinco nuevos conformeros para la peonidina, treinta y cuatro para la petunidina, y diecinueve para la malvidina. La correcta caracterización del espacio conformacional de estos compuestos permitió demostrar la coexistencia de estructuras quinoidales cargadas positivamente junto con otras estructuras de resonancia P y Z. Se emplearon cálculos teóricos para analizar los orbitales moleculares de frontera (HOMO-LUMO), lo que resultó fundamental para explicar la reactividad y bioactividad de estas tres antocianidinas. La polaridad del solvente, la incorporación de grupos donores en el anillo B, y la contribución porcentual de los conformeros P y Z dentro del espacio conformacional influyeron en la actividad antioxidante de estos compuestos.

Conclusiones

Las contribuciones porcentuales de átomos al HOMO resultaron apropiadas para demostrar la actividad antimutagénica como inhibidores enzimáticos, así como los requerimientos estéricos y electrostáticos necesarios para formar el farmacóforo. De las tres, la peonidina se destacó como la antocianidina con mayor actividad antioxidante, mientras que la malvidina mostró ser la más eficaz en términos de actividad antimutagénica.