

EVALUACIÓN DE LA RELACIÓN ESTRUCTURA –ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE DE TERPENOS DE TAGETES MINUTA DE JUJUY POR MÉTODOS COMPUTACIONALES

Adriana C. Olleta, Adriana M. Apaza y Carmen I. Viturro

Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de Jujuy, Italo Palanca 10, A4600FDC, San Salvador de Jujuy, Argentina. aolleta@fi.unju.edu.ar

Los compuestos orgánicos volátiles de plantas que sean ricos en electrones pueden neutralizar a las especies radicalarias. Dentro de estos compuestos se encuentran los terpenos. Los terpenos de las plantas son extensamente usados por sus cualidades aromáticas. Están presentes, por ejemplo, en aceites esenciales de especies aromáticas de la región NOA. Varias de ellas juegan un rol importante en la medicina tradicional y en los remedios herbolarios, y se está investigando en nuestros laboratorios su fitoquímica y la actividad biológica de distintos extractos, en particular la actividad antioxidante¹.

Los terpenos son moléculas muy abundantes en los vegetales y comprenden desde los hemiterpenos hasta poli-isoprenos. Entre los teraterpenos se incluyen los carotenoides y limonoides²⁻³, entre otros. Se encuentran en los alimentos verdes, productos de la soja y en los cereales, constituyen uno de los grupos más amplios de fitonutrientes. Actúan como antioxidantes protegiendo los lípidos, la sangre y demás fluidos corporales del ataque de radicales libres de especies del oxígeno, como oxígeno singlete, y radicales hidroxilo, peróxido y superóxido.

En la actualidad este grupo de fitoquímicos, en especial los terpenos, presentan gran interés debido a sus efectos benéficos en la salud, por lo que numerosas investigaciones han sido enfocadas para evaluar sus propiedades biológicas; sin embargo la información existente respecto a los factores estructurales que influyen en estas propiedades es escasa o nula.

Ante ello surge la necesidad de realizar estudios teóricos que permitan conocer la relación que existe entre la estructura química y las propiedades biológicas tales como la capacidad antioxidante⁴. Hemos detectado una interesante capacidad capturadora de radicales libres en algunos aceites esenciales extraídos de *Tagetes minuta*. Esta es una hierba anual, conocida como suico o chinchilla. Entre otras aplicaciones vernáculas, su aceite esencial (AE) es empleado en las industrias de flavor y de fragancias

El presente trabajo tiene por objeto el modelado molecular de siete terpenos presentes en el AE de *T. minuta* analizado: limoneno, *cis*- β -ocimeno; dihidrotagetona; *trans*-tagetona; *cis*-tagetona; *cis*-tagetenona; *trans*-tagetenona; a fin de comparar sus propiedades estructurales.

El modelado molecular de estos compuestos fue realizado a nivel de teoría B3LYP/6-31G(d) con el conjunto de programas Gaussian 09⁵.

El estudio teórico de los terpenos sugiere que existen varios factores estructurales para que estos presenten una mejor capacidad antioxidante. 1) Los dobles enlaces conjugados 2) la presencia de una función ceto conjugando con un doble enlace 3) la posición *trans* de los enlaces conjugados respecto a la *cis*.

Estos cálculos permiten clarificar el mecanismo de acción de atrapamiento de radicales de los terpenos investigados y de aquellos que serán obtenidos posteriormente.

Referencias:

1. Molina, A. C.; Gonzalez, M. A.; Viturro, C. I.; 2010. *Molecular Medicinal Chemistry*, 21, 60-63.
2. Di Leo Lira, P.; van Bare, C. M.; López, S.; Molina, A.; Heit, C.; Viturro, C. I.; de Lampasona, M. P.; Catalán, C. A.; Bandoni, A., Northwestern of Argentina: a Center of Genetic Diversity of Lemon Verbena (*Aloysia citriodora* Palau, Verbenaceae). Aceptado para publicar el 13 de febrero de 2012 en *Chemistry & Biodiversity* (Reg. No. C11416).
3. Liendro, N.; Uriburu, M. L.; Viturro, C. I.; Gil, R.; Novara, L. J.; de la Fuente, J. R., 2007, *Biochemical Systematics and Ecology* 35, 720-724.
4. Miguel, M. C.; 2010, *Flavour and Fragrance Journal*, 25, 5, 291-312.
5. Gaussian 09, Revision A.1, Frisch, M. J.; Trucks, G. W.; Schlegel, H. B.; Scuseria, G. E.; Robb, M. A.; Cheeseman, J. R.; Scalmani, G.; Barone, V.; Mennucci, B.; Petersson, G. A.; Nakatsuji, H.; Caricato, M.; Li, X.; Hratchian, H. P.; Izmaylov, A. F.; Bloino, J.; Zheng, G.; Sonnenberg, J. L.; Hada, M.; Ehara, M.; Toyota, K.; Fukuda, R.; Hasegawa, J.; Ishida, M.; Nakajima, T.; Honda, Y.; Kitao, O.; Nakai, H.; Vreven, T.; Montgomery, Jr., J. A.; Peralta, J. E.; Ogliaro, F.; Bearpark, M.; Heyd, J. J.; Brothers, E.; Kudin, K. N.; Staroverov, V. N.; Kobayashi, R.; Normand, J.; Raghavachari, K.; Rendell, A.; Burant, J. C.; Iyengar, S. S.; Tomasi, J.; Cossi, M.; Rega, N.; Millam, J. M.; Klene, M.; Knox, J. E.; Cross, J. B.; Bakken, V.; Adamo, C.; Jaramillo, J.; Gomperts, R.; Stratmann, R. E.; Yazyev, O.; Austin, A. J.; Cammi, R.; Pomelli, C.; Ochterski, J. W.; Martin, R. L.; Morokuma, K.; Zakrzewski, V. G.; Voth, G. A.; Salvador, P.; Dannenberg, J. J.; Dapprich, S.; Daniels, A. D.; Farkas, Ö.; Foresman, J. B.; Ortiz, J. V.; Cioslowski, J.; Fox, D. J. Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009.