



ESTUDIO TEÓRICO DE LAS INTERACCIONES ENTRE ACETATO DE 1-ETIL-3-METIL IMIDAZOLIO Y EL ÉSTER BENCÍLICO DEL ÁCIDO CAFEICO (CABE)

Maurizio A. Pantoja-Hernández, Zaira Domínguez, Myrna H. Matus
Unidad de Servicios de Apoyo en Resolución Analítica (SARA), Universidad Veracruzana,
Luis Castelazo S/N, Col. Industrial-Ánimas, C.P. 91190, A. P. 575, Xalapa, Ver., México
Dirección de correo: MauAPH92@hotmail.com

Los compuestos fenólicos son metabolitos secundarios que la plantas producen como defensa contra agentes externos como la radiación ultravioleta y agentes patógenos [1]. Dentro de los compuestos fenólicos podemos encontrar a los derivados del ácido cafeico, como el éster bencílico del ácido cafeico (CABE), los cuales se han estudiado debido a sus diversas actividades biológicas, entre las que se encuentran actividad antibacteriana [2], antiproliferativa [3] y antioxidante [4]. Es por lo anterior que se busca la extracción eficiente y amigable al ambiente de estos compuestos a partir de plantas y propóleos.

Los líquidos iónicos (LIs) son sales con temperaturas de fusión menores a los 100 °C [5]. Se ha propuesto el uso de LIs como disolventes para la extracción de compuestos fenólicos [6,7,8] ya que se les puede considerar alternativas “verdes” a los disolventes orgánicos que se usan tradicionalmente en los procesos de extracción; esto es debido a sus propiedades fisicoquímicas particulares, como su baja presión de vapor, amplio espectro de solvatación y alta estabilidad térmica [5]. Con el fin de explorar más a fondo esta aplicación de los LIs, es necesario conocer como interactúan LI y compuesto fenólico y es por ello que en este trabajo se propone un estudio teórico de las interacciones intermoleculares entre un LI, acetato de 1-etil-3-metilimidazolio, y el éster bencílico del ácido cafeico (CABE).

Inicialmente se optimizaron las geometrías tanto del LI a emplear como del CABE, utilizando el método semiempírico PM3, y se buscaron los confórmeros de menor energía, los cuales posteriormente se reoptimizaron empleando la Teoría de Funcionales de la Densidad con el nivel B3LYP/DGDZVP2.

Referencias:

1. Manach, C. *et al. Am. J. Clin. Nutr.* **2004**, 79, 727–747.
2. Velázquez, C. *et al. J Appl. Microbiol.* **2007**, 103, 1747–1756.
3. Jayaprakasam, B. *et al. J. Agric. Food Chem.* **2006**, 54, 5375–5381.
4. Son, S. *et al. J. Agric. Food Chem.* **2002**, 50, 468–472.
5. Chiappe, C.; Pieraccini, D. *J. Phys. Org. Chem.* **2005**, 18, 275–297.
6. Du, F. *et al. Talanta* **2009**, 78, 1177–1184.
7. Ribeiro, B. D. *et al. Ind. Eng. Chem. Res.* **2013**, 52, 12146–12153.
8. Lou, Z. *et al. Analytica Chimica Acta* **2012**, 716, 28–33.