

ESTUDIO TEÓRICO DE LA REACCIÓN DE CICLOADICIÓN [4+2] DE LA QUERCETINA CON LA 3,5-DI-*TERT*-BUTIL-O-QUINONA

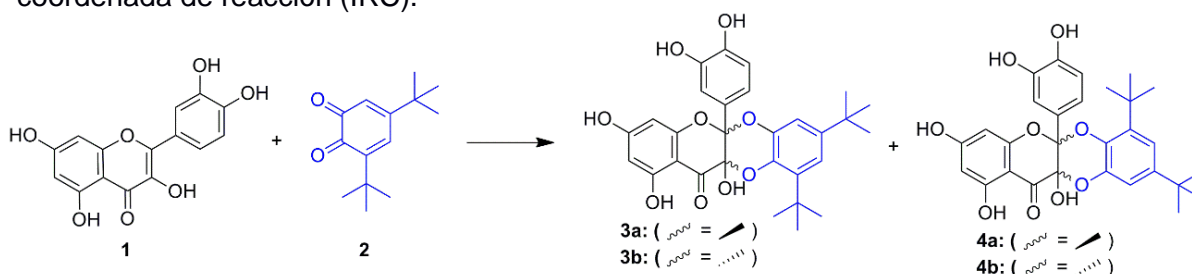
Fernando Tun-Rosado¹, David Cáceres-Castillo², Carolina Castro-Segura¹, Ramiro Quijano-Quiñones¹

¹Laboratorio de Química Teórica, Facultad de Química, UADY; México

²Laboratorio de Química Farmacéutica, Facultad de Química, UADY, México

e-mail: fernando.tr@outlook.com

Los flavonoides son una amplia clase de metabolitos vegetales, dentro de este grupo de polifenoles secundarios, la quercetina es la flavona más común y ampliamente conocida por sus propiedades antioxidantes. La actividad antioxidante de la quercetina se ha relacionado con muchos factores incluyendo su estructura química. Algunos estudios sugieren una relación entre el proceso de oxidación de la quercetina con la formación de dímeros unidos a través de un anillo de dioxano, el cual podría ser el resultado de una cicloadición Diels-Alder.¹ En este trabajo se implementaron cálculos basados en la Teoría Funcional de la Densidad (DFT) para analizar la reacción de cicloadición de la quercetina con una o-benzoquinona. Todos los cálculos para la cicloadición de la quercetina **1** con la 3,5-di-*tert*-butil-o-quinona **2** (Esquema 1) se llevaron a cabo con el funcional M06-2X en combinación con la base 6-31+G(*d,p*).² Los cálculos se efectuaron con el programa Gaussian09. Se analizaron las geometrías moleculares de los puntos estacionarios, la naturaleza de la demanda electrónica de la reacción, las energías libres de Gibbs de reacción y activación para los estados de transición *endo/exo*. Además se estudió la influencia del disolvente en la cicloadición con el modelo CPCM.³ La selectividad se analizó utilizando diversas particiones energéticas y estudiando las interacciones no-covalentes a través del cálculo del gradiente reducido de la densidad electrónica⁴ como función de la coordenada de reacción (IRC).



Esquema 1. Formación de los dímeros de quercetina a través de una cicloadición [4+2].

Referencias

- (1) Cáceres-Castillo, D.; Moguel-Perdío, F.; Quijano-Quiñones, R.; Mirón-López, G.; Mena-Rejón, G. *Letters. Org. Chem.* **2016**, *13*, 107-112.
- (2) Zhao, Y.; Truhlar, D. G. *Theor. Chem. Acc.* **2008**, *50*, 215-241
- (3) Marianski, M.; Dannenberg, J. J. *J. Phys. Chem. B*, **2012**, *116*, 1437-1445.
- (4) Contreras-García, J.; Johnson, E. R.; Keinan, S.; et al. *J. Chem. Theory Comput.* **2011**, *7*, 625-632.