

XANTHOLUMOL: UN ESTUDIO CINÉTICO A NIVEL DFT

Rogelio Delgado¹, Zeferino Gomez¹

¹Universidad de Colima, Facultad de Ciencias Químicas, Coquimatlán; México
rogelio_delgado@uclm.mx

El xanthohumol (3'-[3,3-dimetilalil]-2',4',4-trihidroxi-6'-metilchalcona) (**XN**) es una chalcona prenilada extraída del lupulo (*Humulus Lupulus L.*), el cual se utiliza en el proceso de fabricación de cerveza¹. El **XN** se ha convertido en un compuesto de interés, ya que ha presentado actividad biológica anti-inflamatoria, antibacteriana, anti-cancerígena y antioxidante² importante. Una desventaja es que presenta una baja solubilidad, con lo cual, los estudios experimentales sobre el **XN** se ven limitados. Debido a eso, se han propuesto estudios teóricos³, así como estudios por formación de biocomplejos⁴. Los estudios teóricos realizados sobre el **XN** se han enfocado en elucidar su estructura y propiedades electrónicas⁵.

En estudios sobre antioxidantes tres mecanismos de reacción principales han sido considerados para la reacción radical-molécula: la transferencia de electrón (TE), transferencia de hidrógeno (TH) y la formación de aducto con el radical (FAR). Se empleó la Teoría de los Funcionales de la Densidad implementada en Gaussian 09, utilizando el funcional de Thrular M052X y el conjunto de bases 6-311+G (d,p), para elucidar la cinética de reacción del **XN** (Figura 1) contra los radicales $\cdot\text{OH}$, y $\cdot\text{OOH}$. Se obtuvo que el mecanismo TE es el más favorecido en medio acuoso, en donde se ha obtenido una $k_{ap} = 2.39 \times 10^6 \text{ Mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$ para el radical $\cdot\text{OOH}$ y de $4.77 \times 10^5 \text{ Mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$ para el radical $\cdot\text{OH}$.

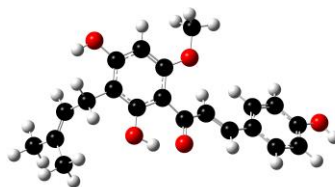


Figura 1. Xanthohumol

1. D. Callemien, *et al.* Agric. Food Chem. 2005, 53, 424–429.
2. Dorn, C.; *et al.* Food Chem. Toxicol. 2010, 48, 1890.
3. S.A.B.E van Acker; *et al.* Free. Rad. Biol. Med. 1996, 20, 331
4. Tronina, T.; *et al.* Bioorg. Med. Chem. Lett. 2013, 23, 1957-1960
5. Erkoc, S.; *et al.* J. Mol. Struct. 2002, 583, 169-172.