



ESTUDIO TEÓRICO DE LA CONVERSIÓN DE LA AFLATOXINA B1 A 8-CLORO-9-HIDROXI-AFLATOXINA B1 POR TRATAMIENTO CON NEW

René Escobedo-González¹, Abraham Méndez-Albores², Tania Villarreal-Barajas³, Juan Manuel Aceves-Hernández¹, René Miranda-Ruvalcaba¹ e Inés Nicolás-Vázquez¹
renerardo.escobedo@gmail.com

¹UNAM-FESC. Campo 1. Departamento de ciencias químicas, Cuautitlán Izcalli.

²UNAM-FESC. Campo 4. Unidad de investigación multidisciplinaria L14 (Alimentos, Micotoxinas y Micotoxicosis), Cuautitlán Izcalli 54714; México

³ Esteripharma SA de CV. Atlacomulco 50450, México;

Las aflatoxinas son micotoxinas carcinogénicas así como genotóxicas que contaminan granos y cereales que representan un problema serio en humanos y ganado, así como efectos graves para la economía agrícola [1]. En años recientes se ha desarrollado un método de desintoxicación para la aflatoxina B1 que resulta amigable para el ambiente, el cual consiste en el lavado de los granos en agua neutra electrolizada (NEW por sus siglas en inglés) [2]. En trabajos relacionados a este método se propone que el proceso de descontaminación elimina los efectos citotóxicos y genotóxicos de la aflatoxina B1 por ruptura del doble enlace presente en el anillo furánico terminal de la aflatoxina B1 transformándose en la 8-cloro-9-hidroxi-aflatoxina B1 [3].

El presente trabajo conllevó el estudio teórico de la molécula de la 8-cloro-9-hidroxi-aflatoxina B1, llevando a cabo su determinación estructural, electrónica y espectroscópica a nivel de DFT. Así mismo, se desarrolló una propuesta mecanística de la formación de 8-cloro-9-hidroxi-aflatoxina B1 a partir de la aflatoxina B1, considerando dos rutas posibles, en las cuales se determinaron sus perfiles energéticos, intermediarios y estados de transición, justificando estas rutas mediante los orbitales frontera de las moléculas involucradas así como las diferencias energética entre dichos orbitales (GAP). En base a los resultados teóricos se explicó la regioquímica del proceso mediante una ayuda anquimérica y la formación de un intermediario carbocatiónico no esperado y justificar la estereoquímica del producto. Adicionalmente a lo antes señalado, se realizó el estudio teórico mediante el programa OSIRIS propiedad de las propiedades farmacológicas y toxicológicas del compuesto estudiado en comparación con la aflatoxina B1 y su epóxido. Es importante señalar que los resultados teóricos mostraron una buena descripción de los datos experimentales.

Referencias: 1. Doyle, M.; Applebaum, R.; Brackett, R.; Marth, E. Physical, chemical and biological degradation of mycotoxins in foods and agricultural commodities. *J. Food Prot.* **1982**, *45*, 964-971. 2. Jardon-Xicotencatl, S.; Díaz-Torres, R.; Marroquín-Cardona, A.; Villarreal-Barajas, T.; Méndez-Albores, A. Detoxification of Aflatoxin-Contaminated Maize by Neutral Electrolyzed Oxidizing Water. *Toxins* **2015**, *7*, 4294-4314. 3. Xiong, K.; Liu, H.j.; Li, L.t. Product identification and safety evaluation of aflatoxin B1 decontaminated by electrolyzed oxidizing water. *J. Agric. Food. Chem.* **2012**, *60*, 9770-9778