



# ESTUDIO EXPERIMENTAL Y TEÓRICO DE LA ACETOGENINA MODIFICADA SQUAMOCIN TRI-ACETILADO



José Ruiz Hidalgo<sup>a</sup>, Adriana Neske<sup>b</sup>, Maximiliano A. Iramain<sup>a</sup>, Patricio Leyton Bongiorno<sup>c</sup>, Silvia A. Brandán<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Cátedra de Química General, Instituto de Química Inorgánica, FBQF, UNT, Ayacucho 471, 4000, S M de Tucumán, Tucumán, Argentina.

<sup>b</sup>UNT-FBQF-Argentina, Instituto de Química Orgánica, Tucumán.

<sup>c</sup>Laboratorio de Fotofísica y Espectroscopia Molecular N°401, Av, Universidad #330, Campus Curauma, Valparaíso, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Chile . E-mail: joserh16@yahoo.com.ar

## INTRODUCCIÓN

Squamocin, es una acetogenina bis-THF,  $\gamma$ -metil  $\gamma$ -lactona  $\alpha,\beta$ -insaturada, aislada del extracto metanólico de *Annona squamosa*. Presenta propiedades insecticida, citotóxica y antitumoral, entre otras. Fue acetilada química y enzimáticamente para corroborar los requerimientos estructurales [1,2,3,4].

## MATERIALES Y MÉTODOS

La caracterización estructural y vibracional de squamocin tri-acetilado fue realizada combinando cálculos derivados de la teoría de los funcionales de la densidad (DFT) con los espectros de infrarrojo y Raman. La estructura inicial fue optimizada con el método híbrido B3LYP/6-31G\* y el programa Gaussian 09. Con los programas NBO y AIM2000 se estudiaron las interacciones intramoleculares y las propiedades topológicas. Además fueron calculados los orbitales fronteras para predecir su reactividad.

## RESULTADOS

Los estudios AIM han revelado la formación de un enlace hidrógeno intramolecular (Fig.1), que le confiere a squamocin tri-acetilado una alta estabilidad

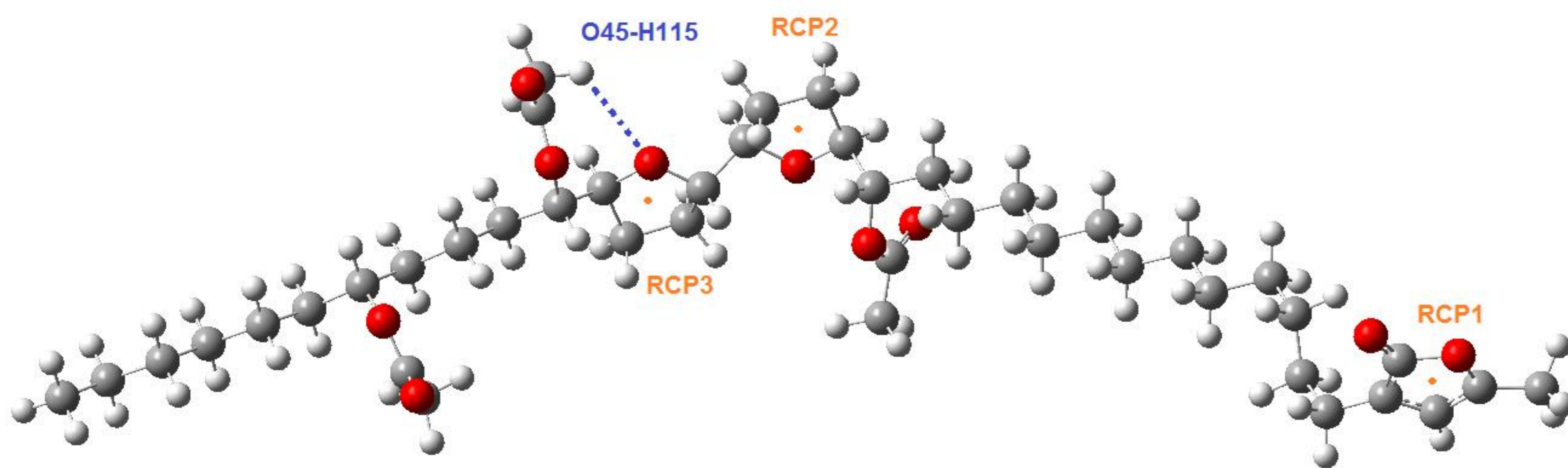


Figura 1: Estructura molecular de squamocin tri-acetilado

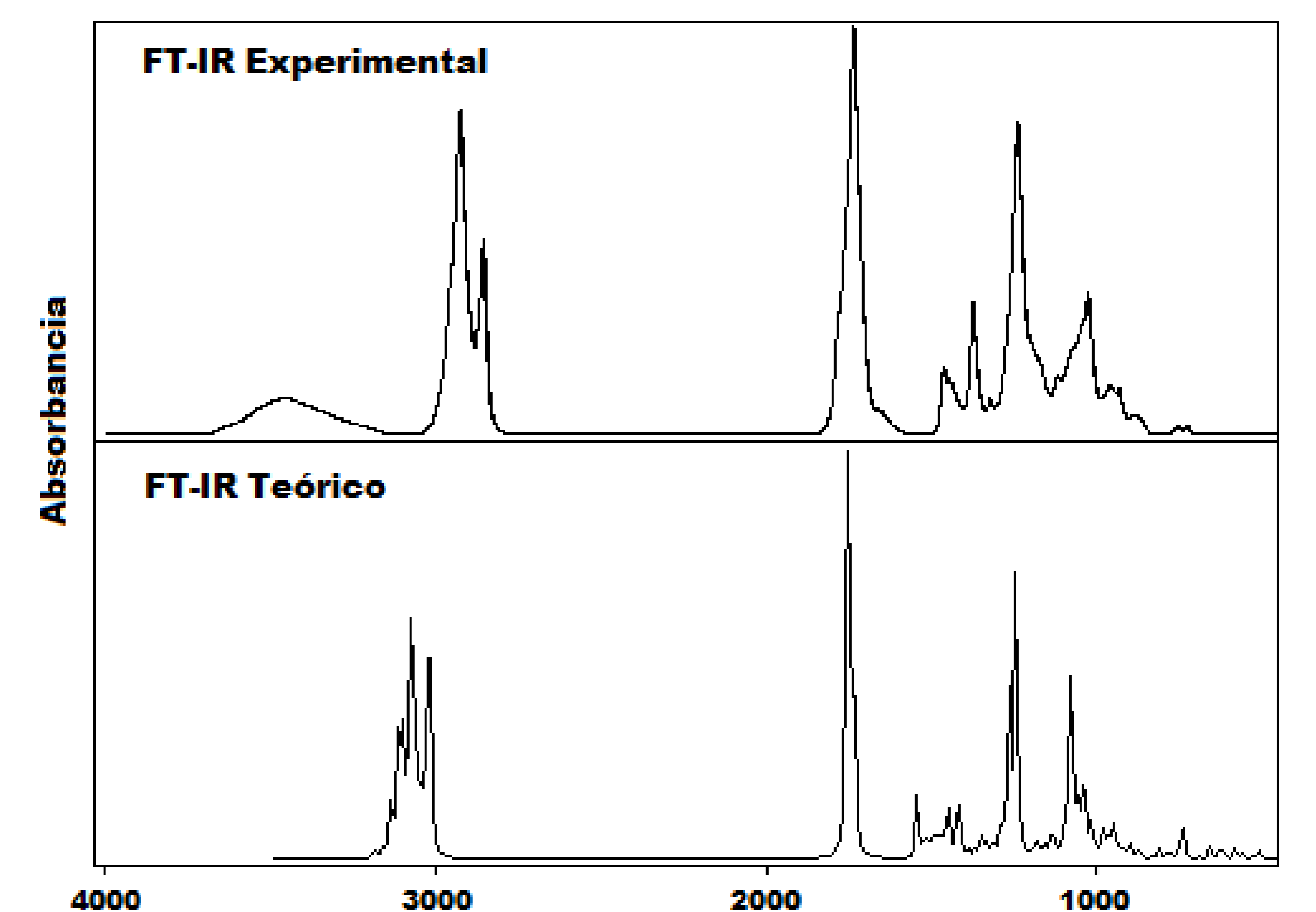


Figura 2: FT-IR experimental y teórico de squamocin tri-acetilado

## CONCLUSIONES

- ✓ Se determinó la estructura teórica de la acetogenina en fase gaseosa mediante el método híbrido B3LYP/6-311++G\*\*.
- ✓ Se calcularon las cargas atómicas, órdenes de enlace, energías de estabilización y propiedades topológicas para la estructura más estable.
- ✓ Las principales bandas observadas en ambos espectros fueron asignadas.
- ✓ Se observaron buenas correlaciones entre los espectros experimentales y teóricos de IR.
- ✓ Se asignaron las principales bandas observadas en ambos espectros vibracionales.

## REFERENCIAS

- 1) J.A. Bombasaro y col., *J. Mol. Struct*, 2011, 1003, 87-91.
- 2) Ruiz Hidalgo y col, *J. Agric. Chem. Environment*, 2016, 5, 200-210.
- 3) H.Yang y col., *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters*, 2009, 19, 2199-2202.
- 4) Ruiz Hidalgo y col, *Journal of molecular structure*, 2020, 1219, 1-12.