

ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE DE L-DOPA Y ÁCIDO CAFEICO EVALUADOS POR MÉTODOS COMPUTACIONALES Y EXPERIMENTALES

Spinnenhirn Erica D.¹, Avalos Beatriz I.¹, Acevedo Belén A.¹, Traffano-Schiffo María V.¹, Vallejos Margarita M.¹

¹IQUIBA-NEA – FaCENA– UNNE – Av. Libertad 5470, Edificio de Química, 3400, Corrientes, Argentina. email: m.vallejos@conicet.gov.ar

La L-Dopa (LD) y el ácido cafeico (AC) fueron los compuestos fenólicos de mayor concentración detectados en la legumbre *Mucuna pruriens*, la cual es usada frecuentemente como terapia complementaria para el tratamiento de la enfermedad de Parkinson.¹ Asimismo, tanto el AC como la LD pueden actuar como antioxidantes, protegiendo a las células contra los efectos de los radicales libres. En este trabajo, se evaluó la actividad antioxidante de LD y AC. Se exploraron los mecanismos de transferencia de átomo de hidrógeno (HAT), de transferencia de un electrón seguida de transferencia de un protón (SET-PT) y de transferencia de un electrón seguida de pérdida de un electrón (SPLET), empleando cálculos de teoría funcional de densidad (B3LYP/6-311++G(d,p)), en agua, metanol y etanol. Además, se realizó el ensayo de captación de radicales 1,1-difenil-2-picrilhidrazilo (DPPH•), expresado en concentración efectiva 50% (CE₅₀).

La CE₅₀ para el AC (2,13 µg/mL) fue menor que para la LD (4,43 µg/mL), indicando la mayor capacidad antioxidante del primero. SPLET fue el mecanismo termodinámicamente más favorable para ambos compuestos, en los tres solventes analizados. Para ambos compuestos, el OH en la posición *para* resultó ser el más propenso para la abstracción del H y formación del radical libre. La forma neutra y la aniónica del AC mostraron mayor capacidad antioxidante que la LD en su forma zwitterion. Esto se atribuye a la mayor distribución de la densidad de espín sobre la estructura del AC en relación con la LD (Figura 1). Los resultados obtenidos contribuyen a comprender la relación estructura-actividad antioxidante de los compuestos fenólicos.

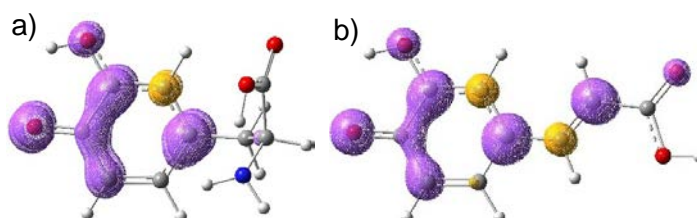


Figura 1. Isosuperficies de densidad de espín para los radicales de a) LD en forma zwitterion y b) CA en

Referencias

(1) Rai, S. N.; Birla, H.; Singh, S. S.; Zahra, W.; Patil, R. R.; Jadhav, J. P.; Gedda, M. R.; Singh, S. P. *Front. Aging Neurosci.* **2017**, 9 421.