

INVESTIGADOR: RODRIGO ASCANIO RAMIREZ TAGLE.

E-MAIL INVESTIGADOR: Ralquin@yahoo.com

TITULO: "RELACION ESTRUCTURA-ACTIVIDAD DE COMPUESTOS ANTIOXIDANTES EN LA FLORA DE USO MEDICINAL CHILENA"

El consumo de alimentos o de hierbas que contengan un alto contenido de compuestos antioxidantes es clave para la prevención de enfermedades como el cáncer, por ello es muy relevante para la salud describir de mejor forma los mecanismos involucrados en la acción de estos compuestos.

Mediante el modelamiento molecular, a partir de la teoría funcional de la densidad DFT es posible describir y establecer relaciones de estructura-actividad de compuestos antioxidantes, particularmente de compuestos como los flavonoides que están presentes en la flora de uso medicinal chilena, los cuales presentan una alta capacidad antioxidante.

Existen descriptores moleculares de la capacidad antioxidante, como el potencial de ionización la energía de enlace de hidrogeno; En el presente proyecto se propone además incluir descriptores de reactividad como nucleofilia-electrofilia, incluir el efecto de la deslocalización electrónica utilizando indicadores como los "Corrientes Químicas Independiente de los Núcleos" (NICS) y "Modelo de Aromaticidad Oscilador Harmónico" (HOMA), finalmente el medio en el cual ocurren las reacciones es muy importante por ello también se propone en este proyecto evaluar el efecto solvente.

A partir de los Resultados obtenidos se pretende establecer una relación estructura-actividad de los compuestos estudiados y proponer nuevos compuestos para su uso como antioxidantes.