



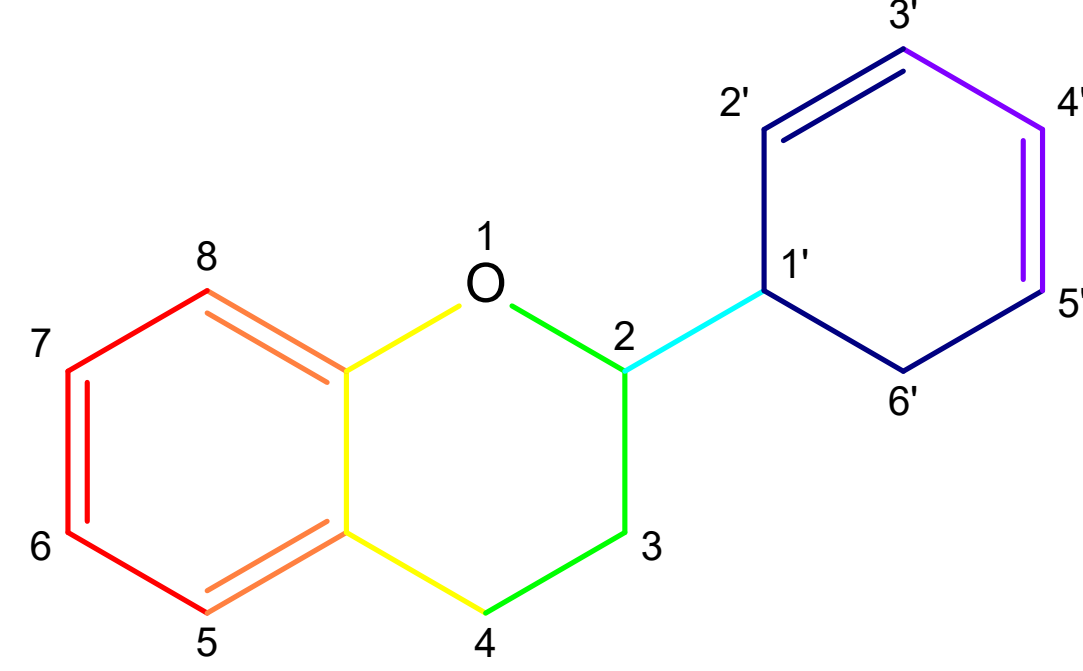
# Evaluación computacional del espectro UV-VIS de flavonoides

Andres E. Perez-Hernandez, Marco A. García-Revilla,\* J. Oscar C. Jiménez-Halla\*  
Universidad de Guanajuato, División de Ciencias Naturales y Exactas

## Introducción

La naturaleza está llena de colores vibrantes y llamativos.

Fig. 1 Estructura base de los flavonoides



En las plantas, los **flavonoides** se posicionan como una de las clases más extendidas de **metabolitos secundarios**.



Fig. 2 *Commelina Comunnis*, Delfidina.

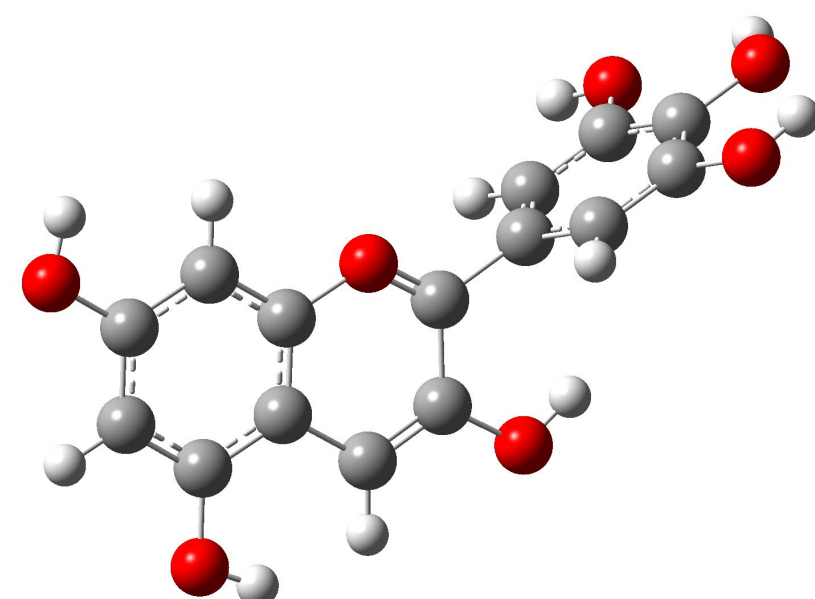
Durante la última década se ha disparado su interés en la **medicina**, especialmente como anticancerígenos debido a sus **propiedades antioxidantes**.

❖ Nuestro objetivo fue realizar un Benchmarking utilizando la **Teoría del Funcional de la densidad (DFT)** para calcular teóricamente los espectros UV-VIS de **flavonoides**.

## Métodos

❑ Software: Gaussian 09W/Gauss-View, ChemCraft.

### 1er Benchmark (Delfidina)



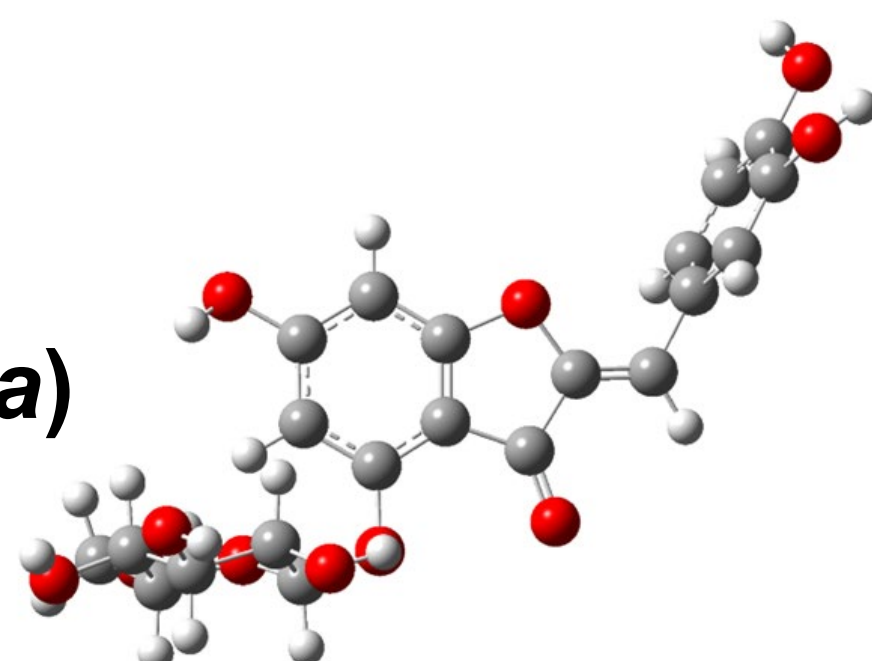
❑ **DFT** Optimización de la geometría y los cálculos de frecuencias (opt-freq):

**Funcionales:** |  $\omega$ B97X-D, CAM-B3LYP,  $\tau$ HCTH<sub>hyb</sub>, M06-HF, LC- $\omega$ PBE |  
**Conjunto base:** def2-svpp

❑ **TD-DFT** Cálculos del espectro UV-VIS

Combinaciones de funcionales  
**Dos conjuntos base:** def2-svpp y def2-tzvpp

### 2do Benchmark (Aurosídina-glicosilada)



- Comparación de mejores niveles de teoría: **Espectro UV-VIS // opt-freq**
- Selección del nivel de teoría final

## Evaluación de distintos flavonoides

-Reportados experimentalmente:

- Luteolina-7-O-glicosilada
- Quercetina

-Espectros **no** reportados experimentalmente:

- Silkone A
- Bougainvinone P
- Pyronmelodorone B

El nivel de teoría  $\tau$ HCTH<sub>hyb</sub>/def2-svpp //  $\omega$ B97X-D/def2-svpp puede calcular con precisión el espectro UV-VIS de emisión en los **flavonoides**.

Con este nivel se determinaron **3 nuevos espectros** de emisión de flavonoides no descritos anteriormente.



## Resultados

Los funcionales  $\omega$ B97X-D y CAM-B3LYP son apropiados para la optimización y cálculos de frecuencias

Delfidina (Valor experimental: 534 nm)						
a	TD-DFT // Opt-Freq			$\lambda$ max (nm) Tc.	$\epsilon$	Energía de excitación vertical
1	$\tau$ HCTH <sub>hyb</sub>	def2-svpp	$\omega$ B97X-D/def2-svpp	532.8	0.2044	2.3272
2		def2-tzvpp		522.8	0.2519	2.3718
3	CAM-B3LYP	def2-tzvpp		448.0	0.5479	2.7673
4		def2-svpp		446.4	0.5715	2.77
5	$\omega$ B97X-D	def2-tzvpp		443.0	0.5388	2.7988
6	LC- $\omega$ PBE	def2-svpp		421.2	0.624	2.9437
7	$\tau$ HCTH <sub>hyb</sub>	def2-svpp	$\tau$ HCTH <sub>hyb</sub> /def2-svpp	529.4	0.2534	2.3419
8		def2-tzvpp		522.4	0.3239	2.3736
9	CAM-B3LYP	def2-svpp		455.8	0.5945	2.7201
10	$\omega$ B97X-D	def2-svpp		450.4	0.5849	2.7528
11	LC- $\omega$ PBE	def2-svpp		388.1	0.1825	3.1945
12	$\tau$ HCTH <sub>hyb</sub>	def2-svpp	CAM-B3LYP/def2-svpp	527.2	0.2114	2.3519
13	CAM-B3LYP	def2-tzvpp		448.8	0.5666	2.7627
14	$\omega$ B97X-D	def2-svpp		441.0	0.5812	2.8116
15	LC- $\omega$ PBE	def2-svpp		423.0	0.6471	2.9303
16	$\tau$ HCTH <sub>hyb</sub>	def2-svpp	LC- $\omega$ PBE/def2-svpp	532.8	0.2031	2.3273
18	LC- $\omega$ PBE	def2-svpp		416.2	0.6131	2.9791
17	$\tau$ HCTH <sub>hyb</sub>	def2-svpp	M06-HF/def2-svpp	526.9	0.2053	2.3529

n. estados = 2. UV-Vis en fase gaseosa. Estado: singlete, carga: 1+

$\tau$ HCTH<sub>hyb</sub> tuvo el mejor desempeño en la obtención de espectros UV-VIS

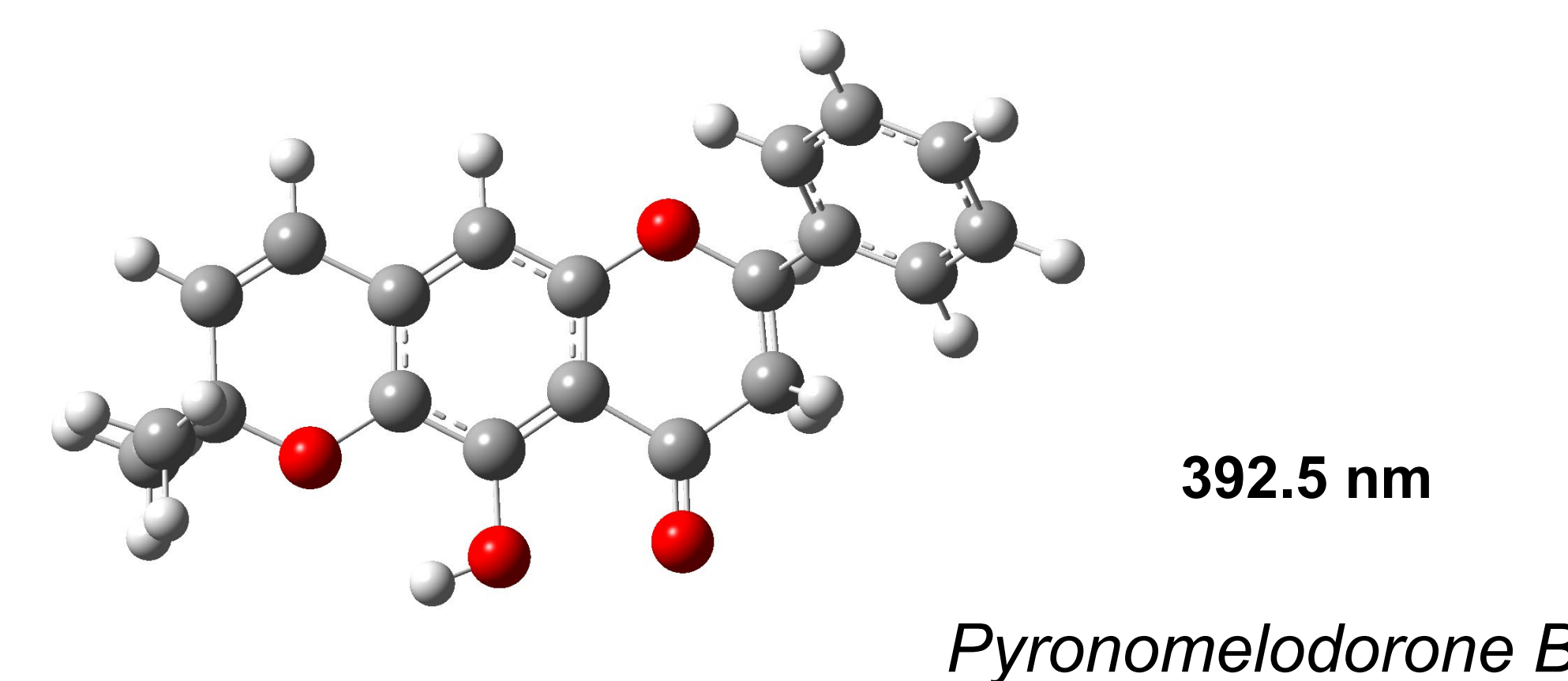
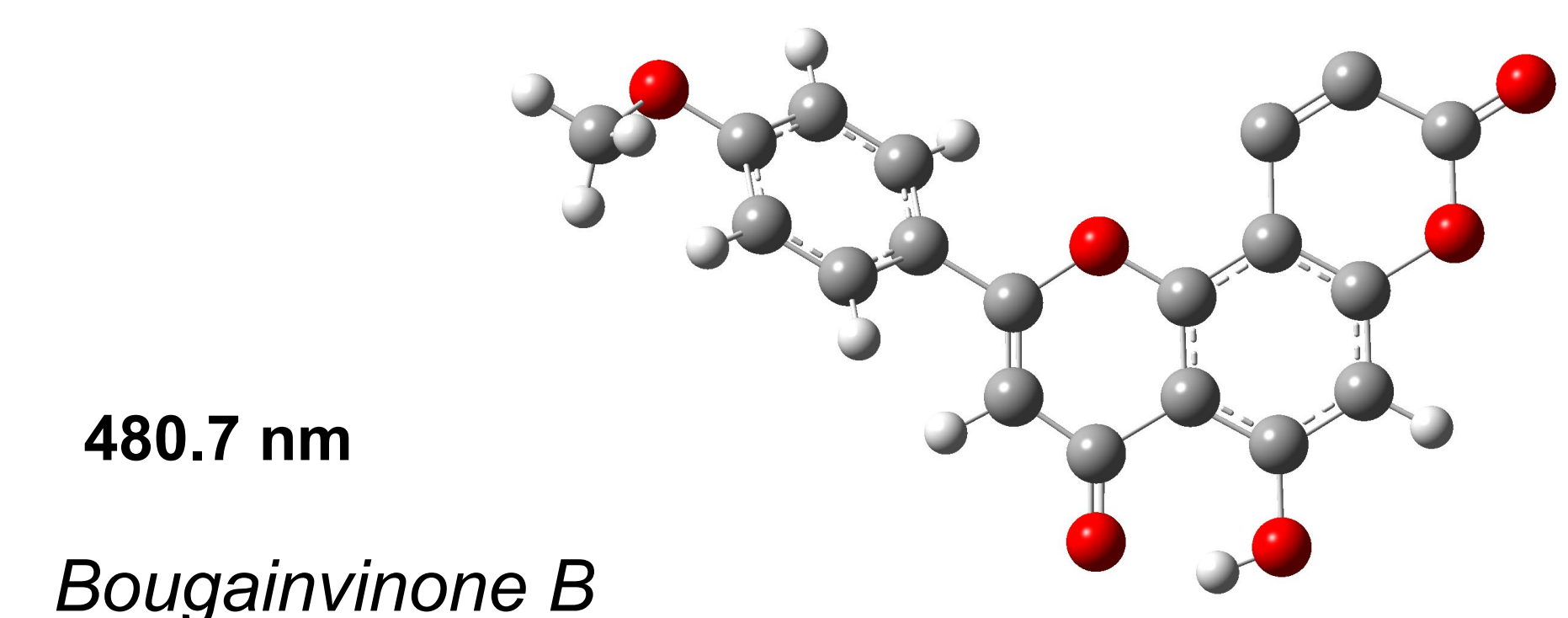
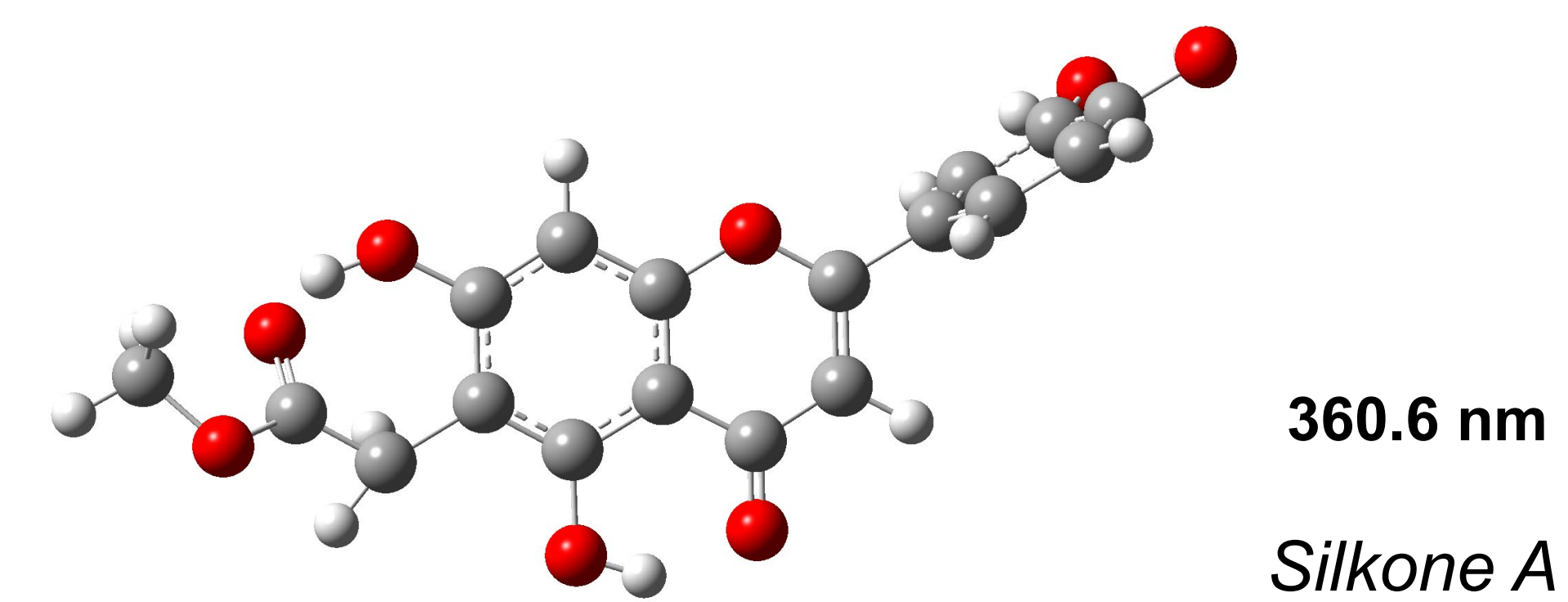
Aureusidina-4-glucósido (Valor experimental: 402 nm)						
b	TD-DFT // Opt-Freq	$\lambda$ max (nm) Tc.	$\epsilon$	Energía de excitación (eV)	% Variación	
1	$\tau$ HCTH <sub>hyb</sub> /def2-svpp// $\omega$ B97X-D/def2-svpp	405.5	0.4529	3.0578	0.8632	
2	$\tau$ HCTH <sub>hyb</sub> /def2-svpp// $\tau$ HCTH <sub>hyb</sub> /def2-svpp	412.0	0.4858	3.0096	2.4801	
3	$\tau$ HCTH <sub>hyb</sub> /def2-svpp//CAM-B3LYP/def2-svpp	405.0	0.4571	3.0612	0.7512	
4	$\tau$ HCTH <sub>hyb</sub> /def2-svpp//LC- $\omega$ PBE/def2-svpp	397.8	0.5314	3.1171	1.0547	

n. estados = 2. UV-Vis en fase gaseosa  
Estado: singlete, carga: 0

Los cálculos en flavonoides neutros como glicosilados concuerdan con lo experimental

$\tau$ HCTH <sub>hyb</sub> /def2-svpp// $\omega$ B97X-D/def2-svpp						
c	Molécula	$\lambda$ max (nm) Exp.	$\lambda$ max (nm) Tc.	$\epsilon$	Energía de excitación (eV)	% Variación
1	Luteolina-7-O-glicosilada	350	357.9	0.0922	3.4645	2.2486
2	Quercitina	372	374.6	0.4361	3.3094	0.7097
3	Silkone A	Sin reportar	360.6	0.1012	3.4381	-
4	Bougainvinone P		480.7	0.0003	2.5791	-
5	Pyronmelodorone B		392.5	0.0278	3.1592	-

n. estados = 2. UV-Vis en fase gaseosa



## Agradecimientos

Este proyecto no hubiera sido posible sin el apoyo de la Universidad de Guanajuato y Laboratorio de supercomputo de alto rendimiento Pípila.

## Referencias

- [1] Berland, H., Albert, N. W., Stavland, A., Jordheim, M., McGhie, T. K., Zhou, Y., Zhang, H., Derolles, S. C., Schwinn, K. E., Jordan, B. R., Davies, K. M. Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. 2019, 116, 20232-20239.
- [2] Corradini, E., Foglia, P., Giansanti, P., Gubbiotti, R., Samperi, R., Laganà, A. Nat. Prod. Res. 2011, 25, 469-495.
- [3] Pérez-Hernández, Andres. E. Las moléculas queer, flavonoides. 1ra ed. 2022, pp 35–40.