

ESTRUCTURA MOLECULAR DE COMPUESTOS FENÓLICOS Y SUS AGREGADOS MOLECULARES PRESENTES EN LA CUTÍCULA VEGETAL

Ana González Moreno¹, M. Carmen Ruiz Delgado², Eva Domínguez¹, Antonio Heredia¹

¹ IHSM-CSIC-UMA, Departamento de Biología Molecular y Bioquímica, Facultad de Ciencias, Universidad de Málaga, 29071, Málaga, gonzalezana@uma.es

² Departamento de Química-Física, Facultad de Ciencias, Universidad de Málaga, 29071, Málaga

La superficie de hojas, tallos y frutos de las plantas superiores está cubierta por una membrana de naturaleza principalmente lipídica denominada cutícula. Esta membrana extracelular actúa como auténtica interfase entre la planta y el medio ambiente [1]. La cutícula está constituida esencialmente por una matriz polimérica de ésteres de polihidroxiácidos grasos de cadena larga, conocida con el nombre de cutina. Asociadas a este biopolímero amorfo se encuentran las ceras cuticulares junto con importantes cantidades de polisacáridos y compuestos fenólicos [2]. Dentro de los compuestos fenólicos en el reino vegetal destaca la familia de los flavonoides. Presentan un amplio espectro de funciones biológicas y juegan un papel fundamental en la interacción entre planta y el medio ambiente. En el caso particular del fruto de tomate sólo un pequeño número de ellos se cuantifican en cantidades significativas, estos son, naringenina, chalconaringenina, kaempferol y quercetina [2].

Con el fin de estudiar la disposición *in vivo* de estos compuestos fenólicos en cutículas de fruto de tomate se han optimizado mediante cálculos DFT (*Density Functional Theory*) la estructura molecular de monómeros aislados de las moléculas ácido *p*-cumárico y naringenina en un entorno que mimetice el escenario macromolecular de la cutícula vegetal; estos resultados han sido contrastados con medidas experimentales de difracción de Rayos-X [3]. Asimismo, se ha realizado una detallada interpretación de sus espectros electrónicos y vibracionales Raman tanto desde un punto de vista teórico como experimental, que junto con un estudio de sus orbitales moleculares nos han permitido establecer una primera aproximación sobre la disposición de estas moléculas en el interior del biopolímero amorfo de cutina. Por otra parte se estudió la posibilidad de formación de *clusters*, agregados moleculares (homodímeros y heterodímeros) diseñados a partir de las geometrías optimizadas de los monómeros de las moléculas implicadas.

Referencias

- [1] Domínguez, E., Heredia-Guerrero, J.A., Heredia, A. *New Phytologist*. 2011, 189, 938-949.
- [2] Domínguez, E., Luque, P., Heredia, A. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*. 2009, 57, 7560-7564.
- [3] Shin, W., Lah, M.S., *Acta Crystallographica*. 1986, 42, 626-628.