

Compuestos bioactivos provenientes de desechos de la agricultura. Estudios de estructura-reactividad utilizando herramientas experimentales y computacionales

Responsable: Dra. Margarita M. Vallejos

Email contacto: vallejos.marga@gmail.com; m.vallejos@conicet.gov.ar

La agricultura es una de las actividades económicas más importantes del Nordeste Argentino (NEA), la cual genera grandes cantidades de desechos que, en su mayoría, no han sido aprovechados eficientemente. Las semillas de las legumbres cultivadas en la región NEA, por ejemplo, *Mucuna pruriens*, *Dolicho lab lab*, *Cajanus cajan*, son utilizadas en la preparación de alimentos y ventas de excedente, mientras que sus vainas son usadas como abono orgánico, combustible o son desechadas. Las vainas de las legumbres pueden contener interesantes compuestos bioactivos, como son los polifenoles, sin embargo, la información sobre su composición es limitada. Como necesidad de un aprovechamiento integral de cultivos de la región, esta línea de investigación está orientada a generar conocimientos que permitan dar valor agregado a las vainas de las legumbres cultivadas en el NEA, apuntando a la obtención de compuestos bioactivos con potencial aplicación en la industria alimentaria y/o farmacológica.

Determinaciones:

- Extracción de compuestos bioactivos de matrices vegetales utilizando diferentes métodos.
- Determinación y cuantificación de compuestos polifenólicos totales, flavonoides totales, L-dopa (en *Mucuna pruriens*), etc.
- Separación y purificación de los extractos empleando cromatografía en columna.
- Determinación estructural utilizando técnica Espectroscopia de Infrarrojo (IR), Resonancia Magnética Nuclear (RMN) y Espectrometría de Masa.
- Perfil polifenólicos de los extractos (HPLC).
- Determinación de cambios en la composición y actividad biológica de los extractos luego de la digestión simulada.
- Evaluación de la actividad antioxidante y antiinflamatoria de los extractos.

- Estudios computacionales dirigidos a lograr una mejor comprensión de la estructura y reactividad de los compuestos bioactivos detectados experimentalmente y al diseño racional de nuevos compuestos. Se realiza cálculos basados en la teoría del funcional de la densidad (DFT), en la teoría cuántica de átomos en moléculas (QTAIM), en el índice de interacciones no covalentes (NCI), en los Orbitales naturales de Enlace (NBO), etc.