

ANÁLISIS ESTRUCTURAL Y ACTIVIDAD ANTIMICROBIANA DEL ISTANBULIN G

Maricel G. Rodríguez^{1*}, Luz Arancibia², Mariana Naspi², Graciela Pucci², Florencia Di Salvo¹

¹ Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física/INQUIMAE-CONICET, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Ciudad Universitaria (1428EHA) - C.A.B.A Argentina.

² Departamento de Química, Centro de Investigación en Microbiología Aplicada (CEIMA), Facultad de Ciencias Naturales y Ciencias de la Salud, Universidad Nacional de la Patagonia San Juan Bosco. km 4, s/nº, Comodoro Rivadavia. Chubut, Argentina.

*mgrodriguez@qi.fcen.uba.ar

El compuesto Istanbulin G (**1**), 1ceto-8 hidroxí-10 α H-eremofil-7-(11)-en-8,12-olida, es un producto natural que pertenece a la familia de las eremofilanolidas, fue aislado de la especie *Senecio filaginoides* DC (Asteraceae), una de las 300 especies de *Senecio* nativas que existen a lo largo en la Argentina [1]. Luego de su purificación, se llevó a cabo la caracterización utilizando diferentes técnicas espectroscópicas como RMN multinuclear en 1D y 2D, UV, IR y EM-ESI. En base a estudios de difracción de rayos X de monocristal (sDRX) fue posible confirmar la estructura propuesta y determinar su configuración absoluta (Fig.1). El análisis supramolecular de **1** reveló que el empaquetamiento cristalino está principalmente gobernado por las interacciones O–H \cdots O entre el OH y el grupo carbonilo de la cetona, dando lugar a la formación de una cadena a lo largo del eje cristalográfico *a*. Por otra parte, diferentes interacciones C–H \cdots O entre los grupos metilo y metileno y el grupo carbonilo del éster y el átomo O del alcohol completan el arreglo cristalino tridimensional. De manera complementaria, las interacciones de la estructura supramolecular de **1** fueron analizadas con las superficies de Hirshfeld y sus respectivos histogramas bidimensionales [2] y comparadas con su polimorfo Istanbulin A reportado previamente en bibliografía [3]. Aunque en ambas estructuras cristalinas las principales interacciones son O–H \cdots O e involucran además los mismos grupos funcionales, **1** presenta otros contactos relevantes de corto alcance, como son los C–H \cdots O, que podrían ser como consecuencia de una estructura cristalina de mayor simetría que la descrita previamente.

Finalmente, la actividad antimicrobiana de **1** fue evaluada contra bacterias Gram Negativas, destacando, *Escherichia coli*, entre otras. Demostrando su efectividad a través de la concentración inhibitoria mínima (MIC) con valores que van desde 100 a 250 μ g/mL.

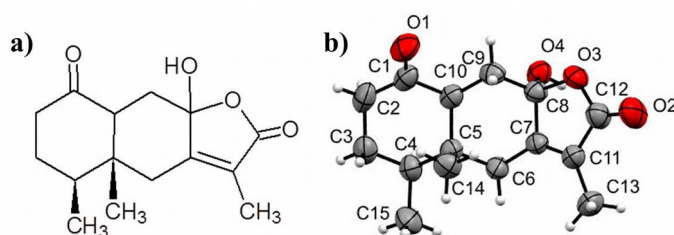


Figura 1: a) Estructura propuesta para **1** basada en los datos espectroscópicos y b) Estructura molecular determinada por sDRX.

Palabras clave: Istanbulin G, análisis estructural, actividad antimicrobiana.

[1] A. Cabrera. Flora Patagónica. Argentina: Correa, 1971.

[2] F. L. Hirshfeld, Theoret. Chim. Acta (Berl), 44 (1977) 129-138.

[3] M. López-Rodríguez, M. Reina, D. Domínguez-Díaz, V. Fajardo, L. Villarroel, Acta Crystallogr Sect E (2009) 65:2330.