



Ciencia Latina Revista Científica Multidisciplinar, Ciudad de México, México.
ISSN 2707-2207 / ISSN 2707-2215 (en línea), marzo-abril 2025,
Volumen 9, Número 2.

https://doi.org/10.37811/cl_rcm.v9i2

ANÁLISIS DE LA QUERCETINA EN JAMAICA (HIBISCUS SABDARIFFA) MEDIANTE QUÍMICA CUÁNTICA: ESTRUCTURA, PROPIEDADES Y APLICACIONES

QUANTUM CHEMISTRY ANALYSIS OF QUERCETIN IN
JAMAICA (HIBISCUS SABDARIFFA): STRUCTURE, PROPERTIES
AND APPLICATIONS

Dr. Manuel González Pérez

Universidad Tecnológica De Tecamachalco, México

Carlos Ángel Briones Colula

Universidad Tecnológica De Tecamachalco, México

Marisol Merino García

Universidad Tecnológica De Tecamachalco, México

Lizette Paulino Pérez

Universidad Tecnológica De Tecamachalco, México

Omar Alessandro Pérez Flores

Universidad Tecnológica De Tecamachalco, México

DOI: https://doi.org/10.37811/cl_rcm.v9i2.17582

Análisis de la Quercetina en Jamaica (*Hibiscus sabdariffa*) mediante Química Cuántica: Estructura, Propiedades y Aplicaciones

Dr. Manuel González Pérez¹m.gonzalez.perez@personal.uttecama.edu.mx<https://orcid.org/0000-0001-8700-2866>Universidad Tecnológica De Tecamachalco
UTTECAMAgricultura Sustentable Y Protegida
Puebla México**Carlos Ángel Briones Colula**brionescarlos385@gmail.com<https://orcid.org/0009-0001-4148-9637>Universidad Tecnológica De Tecamachalco
UTTECAMAgricultura Sustentable Y Protegida
Puebla México**Marisol Merino García**mmarisolm531@gmail.com<https://orcid.org/0009-0000-1658-2779>Universidad Tecnológica De Tecamachalco
UTTECAMAgricultura Sustentable Y Protegida
Puebla México**Lizette Paulino Pérez**lizpaupe23@gmail.com<https://orcid.org/0009-0005-9399-3527>Universidad Tecnológica De Tecamachalco
UTTECAMAgricultura Sustentable Y Protegida
Puebla México**Omar Alessandro Pérez Flores**op10aless@gmail.com<https://orcid.org/0009-0001-1796-0353>Universidad Tecnológica De Tecamachalco
UTTECAMAgricultura Sustentable Y Protegida
Puebla México

RESUMEN

La flor de Jamaica (*Hibiscus sabdariffa*) es una planta tropical de la familia Malvaceae, conocida por sus flores de color rojo intenso. Se cultiva principalmente en regiones cálidas de México, América Central, el Caribe, África y Asia. La quercetina (QCT) es uno de los principales componentes de la flor de Jamaica. Esta investigación tuvo como objetivo analizar la QCT en la flor de Jamaica mediante química cuántica. La teoría del coeficiente de transferencia de electrones (CTE) se utilizó como base principal para calcular las interacciones cuánticas entre las moléculas de aminoácidos (AAs) secuenciadas en proteínas tisulares. Se utilizó el software Hypechem Semiempirical PM3 para los cálculos cuánticos. Los resultados mostraron que la QCT interactúa con los veinte AAs del cuerpo humano, oxidándolos. En otras palabras, la QCT es un agente oxidante para los veinte AAs que componen el cuerpo humano, ya sea solos o secuenciados como proteínas. La conclusión es que la fuerza electromotriz (FEM) es equivalente al PE cuántico. El electrón salta a través de la banda prohibida (BP) más pequeña siguiendo el principio de mínima acción. La interacción más relacionada, secuenciada y probable es cuando el HOMO de Arg aporta al menos un electrón al LUMO del QCT.

Palabras clave: Jamaica, quercetina, aminoácidos, química cuántica, pozo cuántico

¹ Autor principal

Correspondencia: m.gonzalez.perez@personal.uttecama.edu.mx

Quantum Chemistry Analysis of Quercetin in Jamaica (Hibiscus Sabdariffa): Structure, Properties and Applications

ABSTRACT

The hibiscus flower (*Hibiscus sabdariffa*) is a tropical plant from the Malvaceae family, known for its deep red flowers. It is primarily grown in warm regions of Mexico, Central America, the Caribbean, Africa, and Asia. Quercetin is one of the main components of hibiscus. This research aimed to analyze quercetin in hibiscus using quantum chemistry. The electron transfer coefficient (ETC) theory was used as the primary basis to calculate the quantum interactions between amino acid (AA) molecules sequenced in tissue proteins. Hyprchem Semiempirical PM3 software was used for the quantum calculations. The results showed that QCT interacts with all twenty AAs in the human body, oxidizing them. In other words, QCT is an oxidizing agent for the twenty AAs that make up the human body, either alone or sequenced as proteins. The conclusion is that the electromotive force (EMF) is equivalent to the quantum EP. The electron jumps through the smallest band gap (BG) following the principle of least action. The most related, consequential, and probable interaction is when the HOMO of Arg contributes at least one electron to the LUMO of the QCT.

Keywords: hibiscus flower, quercetin, amino acids, quantum chemistry, quantum well

*Artículo recibido 05 abril 2025
Aceptado para publicación: 28 abril 2025*



INTRODUCCIÓN

La flor de Jamaica

La flor de Jamaica (*Hibiscus sabdariffa*) es una planta tropical de la familia de las Malváceas, conocida por sus vistosas y carnosas flores de color rojo intenso. Se cultiva principalmente en regiones cálidas como México, Centroamérica, el Caribe, África y el sudeste asiático. (Montaño Arango., et al 2024) (Molina, 2021) (Morales, 2020).

La planta de esta fruta se desarrolla mejor en regiones con clima tropical y subtropical y su cultivo se realiza en la época primavera-verano, al iniciar la temporada de lluvias; mientras que su cosecha en los meses de octubre y noviembre. Asimismo, su comercialización, en granel (sin empaquetar) y el resto en extractos y mermeladas, se lleva a cabo entre diciembre y marzo.

En Guerrero, entidad en la que más se produce, se cultiva a manera de tradición cultural; principalmente en los municipios de Tecomanapa, Ayutla, Juan R. Escudero y San Marcos. Es igualmente un producto de gran demanda comercial en el mercado nacional e internacional, gracias a sus diversas utilidades culinarias. (Portillo, 2020).

La QCT. Componente principal de la Jamaica

Propiedades medicinales de la QCT

Antioxidante: La QCT tiene propiedades antioxidantes, lo que significa que puede ayudar a proteger las células del daño causado por los radicales libres.

Antiinflamatoria: La QCT tiene propiedades antiinflamatorias, lo que puede ayudar a reducir la inflamación y el dolor en el cuerpo.

Antimicrobiana: La QCT tiene propiedades antimicrobianas, lo que puede ayudar a prevenir la propagación de bacterias y virus.

Cardiovascular: La QCT puede ayudar a reducir la presión arterial y mejorar la función cardiovascular.

Anticancerígena: La QCT se ha investigado por sus propiedades anticancerígenas, y se ha encontrado que puede ayudar a prevenir la proliferación de células cancerígenas.

Neuroprotectora: La QCT puede ayudar a proteger las neuronas del daño causado por los radicales libres y la inflamación.



Inmunomoduladora: La QCT puede ayudar a regular el sistema inmunológico y prevenir la respuesta inflamatoria excesiva. (Garduño et al., 2025) (Qi, 2022) (Hosseini, Razavi et al., 2021) (Alizadeh y Ebrahimzadeh, 2021) (Cui et al., 2022) (Yang, 2020)

La Química Cuántica

La química cuántica tiene aplicaciones fascinantes en diversas áreas, desde la investigación molecular hasta el diseño de nuevos materiales y medicamentos. (Cjuno, y Arroyo, 2003). Se basa en los principios de la mecánica cuántica para entender y predecir el comportamiento de los electrones en átomos y moléculas. Algunas de sus principales aplicaciones incluyen:

Modelado de moléculas y reacciones químicas: Permite simular cómo interactúan los electrones en moléculas complejas, ayudando a comprender mecanismos de reacción y estabilidad molecular. (Rodríguez-Castellanos, 2025) (Sánchez y Lorenzo, 2025) (Moreno Ceballos, 2024)

Farmacología computacional: Se usa en el diseño de nuevos medicamentos mediante métodos como la teoría funcional de la densidad (DFT) y semiempíricos como PM3, que ayudan a optimizar interacciones moleculares y encontrar compuestos más efectivos. (Fiallos y Sánchez, 2024)

Desarrollo de materiales avanzados: Se aplica en el diseño de superconductores, polímeros con propiedades específicas y materiales con aplicaciones tecnológicas y biomédicas. (Poater, 2024).

Química atmosférica y medioambiental: Permite estudiar contaminantes, su impacto en el medio ambiente y mecanismos de reacción que afectan el clima y la calidad del aire.

Nanotecnología y bioquímica: Ayuda en el desarrollo de nanomateriales, sensores moleculares y en el entendimiento de biomoléculas clave para la vida.

METODOLOGÍA

Se utilizó como base principal la teoría del coeficiente de transferencia electrónica (CTE), con el fin de calcular las interacciones cuánticas entre las moléculas de los AAs secuenciados en las proteínas de los tejidos. Para los cálculos cuánticos se utilizó el software Hyprchem Semiempirical PM3. Se calcularon los orbitales de valencia HOMO y LUMO para luego obtener la BP. Por otro lado, se calcularon las densidades de estas nubes para obtener los vectores del PE a nivel cuántico. Luego se dividieron estos dos conceptos y así se obtuvo el CTE.



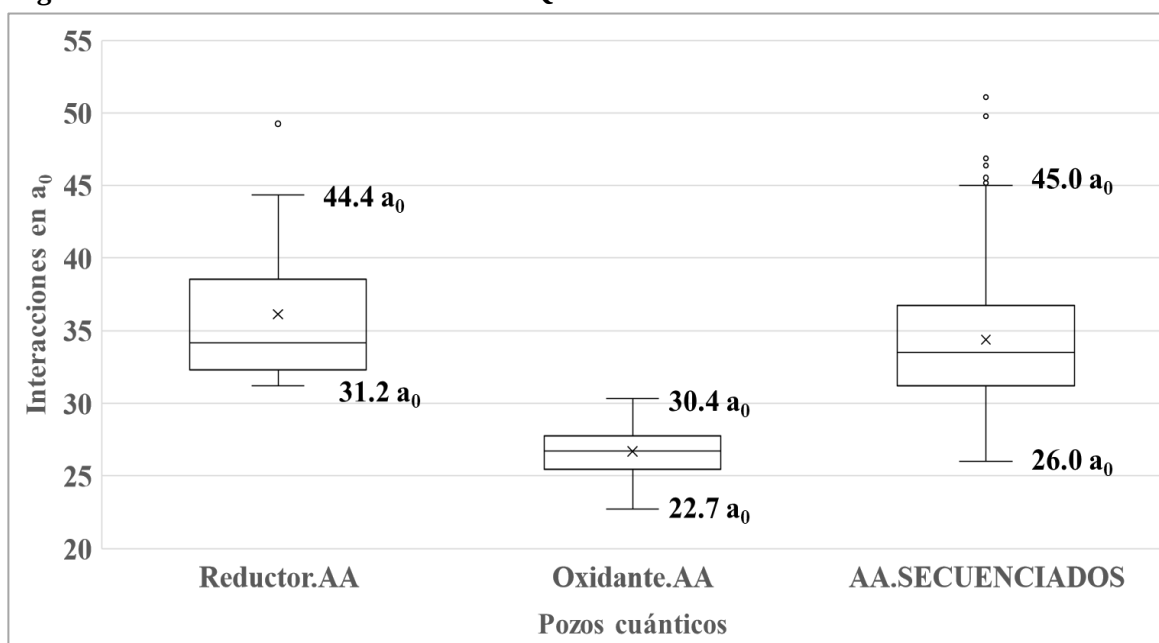
El CTE se interpreta como la longitud del resorte de estiramiento considerando la ley de Hooke. Sus unidades se enuncian en radios de Bohr (a_0). A mayor longitud de resorte, menor afinidad entre las moléculas. (González-Pérez, 2017 A y B) (Pérez et al., 2024) (Pérez et al., 2019)

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En la figura 1 se presentan tres diagramas de cajas y bigotes. El eje “x” se refiere a las interacciones reportadas en radios de Bohr (a_0). El eje “y” muestra a los tres pozos cuánticos de las interacciones. De izquierda a derecha, el primer pozo representa la agrupación de 61 interacciones de la QCT como agente reductor (antioxidante) de los 20 AAs del cuerpo humano. El segundo pozo muestra la agrupación de 61 interacciones de la QCT como agente oxidante de los mismos AAs. El tercer pozo, representa el agrupamiento de 400 interacciones moleculares resultados de una ordenación de los 20 AAs tomados de dos en dos. Estas interacciones son puras, naturales y con la posibilidad de ser secuenciados como proteínas.

El pozo oxidante tiene el valor mínimo de $22.7 a_0$, esto significa que las interacciones oxidantes de la QCT vs AAs tiene mayor afinidad que las interacciones reductoras (antioxidantes).

Figura 1. Interacciones moleculares de la QCT vs AAs

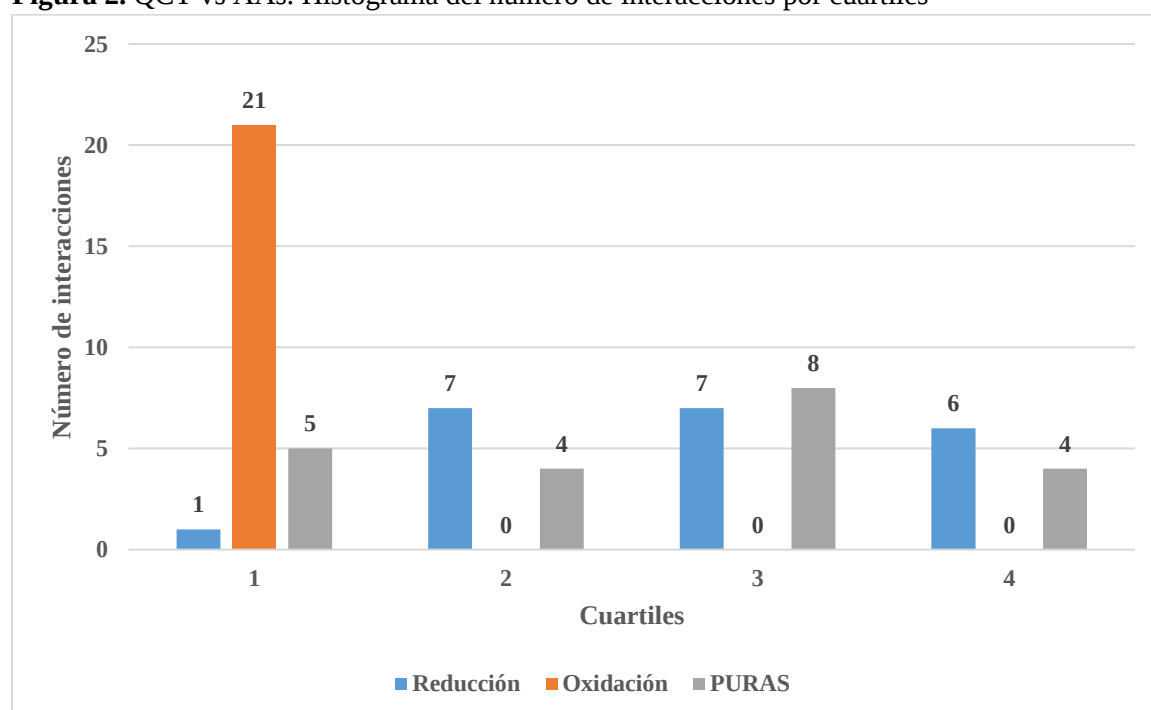


En la figura 2, el eje “x” representa los cuartiles de 441 interacciones de los AAs en general, incluye a la QCT como agente oxidante o reductor. Estas interacciones también incluyen a los AAs repetidos en la misma dupla, por ejemplo: Arg-Arg, Leu-Leu. En general, con estas interacciones se toman en cuenta los AAs secuenciados como proteínas o péptidos.

El eje “y” nos indica el número de interacciones posibles (barras): Azul = reductoras, naranja = oxidantes y Gris = puras.

En el primer cuartil observamos una barra naranja de 21 interacciones. Este fenómeno nos indica que la QCT actúa como agente oxidante para todos los AAs del cuerpo humano y lo hace en forma oxidante.

Figura 2. QCT vs AAs. Histograma del número de interacciones por cuartiles



Podemos ver en esta tabla 1 detalladamente, parte del primer cuadrante de las interacciones oxidantes (columna 3) de la QCT y los AAs, se omiten varias interacciones por razones de espacio. Este fenómeno nos indica que la QCT tiene una excelente afinidad oxidativa por los veinte AAs del cuerpo humano. ¿Por qué se comporta como antioxidante entonces? Porque oxida primero y cuando se presenta un radical oxidante ya está ocupado el AA que puede atacar este radical libre. Es como una capa protectora.

Se sugiere estudiar más la farmacocinética de la QCT con respecto a los AAs.

Tabla 1. Interacciones REDOX cuánticas moleculares de la QCT y los AAs

Pozo	Agente Reductor	Agente Oxidante	HOMO eV	LUMO eV	BP eV	E- eV/a ₀	E+ eV/a ₀	PE eV/a ₀	CTE a ₀
61	QCT	Val	-8.573	0.931	9.504	-0.084	0.109	0.193	49.245
<i>Se omiten estas interacciones por razones de espacio</i>									
21	His	His	-9.307	0.503	9.811	-0.169	0.171	0.340	28.855
20	Met	Met	-9.062	0.145	9.207	-0.134	0.192	0.326	28.243
19	Gln	QCT	-10.023	-0.752	9.271	-0.124	0.206	0.330	28.093
18	Thr	QCT	-9.896	-0.752	9.144	-0.123	0.206	0.329	27.794
17	Asn	QCT	-9.929	-0.752	9.177	-0.125	0.206	0.331	27.724
16	Ala	QCT	-9.879	-0.752	9.126	-0.124	0.206	0.330	27.656
15	Ile	QCT	-9.872	-0.752	9.120	-0.128	0.206	0.334	27.305
14	Val	QCT	-9.914	-0.752	9.161	-0.131	0.206	0.337	27.185
13	QCT	QCT	-8.573	-0.752	7.821	-0.084	0.206	0.290	26.968
12	Leu	QCT	-9.645	-0.752	8.893	-0.126	0.206	0.332	26.786
11	Arg	Arg	-9.176	0.558	9.734	-0.165	0.199	0.364	26.742
10	Gly	QCT	-9.902	-0.752	9.150	-0.137	0.206	0.343	26.677
9	Cys	QCT	-9.639	-0.752	8.886	-0.129	0.206	0.335	26.527
8	Phe	QCT	-9.553	-0.752	8.801	-0.126	0.206	0.332	26.508
7	Lys	QCT	-9.521	-0.752	8.768	-0.127	0.206	0.333	26.331
6	Pro	QCT	-9.447	-0.752	8.694	-0.128	0.206	0.334	26.030
5	Tyr	QCT	-9.056	-0.752	8.304	-0.123	0.206	0.329	25.239
4	Met	QCT	-9.062	-0.752	8.310	-0.134	0.206	0.340	24.440
3	Trp	QCT	-8.299	-0.752	7.546	-0.112	0.206	0.318	23.730
2	His	QCT	-9.307	-0.752	8.555	-0.169	0.206	0.375	22.814
1	Arg	QCT	-9.176	-0.752	8.424	-0.165	0.206	0.371	22.706

La figura 3 contiene la explicación del Principio de Mínima Acción o principio de Hamilton, establece que “La evolución temporal de todo sistema físico se da de tal manera que una cantidad denominada «acción» tiende a ser la mínima posible”. Este principio fue desarrollado por varios físicos, incluyendo Maupertuis, Euler y Lagrange, y es esencial en la mecánica clásica y en la teoría cuántica. Se hizo a propósito con el fondo del pozo cuántico de todas las interacciones Redox (Interacción 1, Tabla 1). Es algo parecido a la ley de Hooke de resortes. Las moléculas se mueven como sostenidas por un resorte

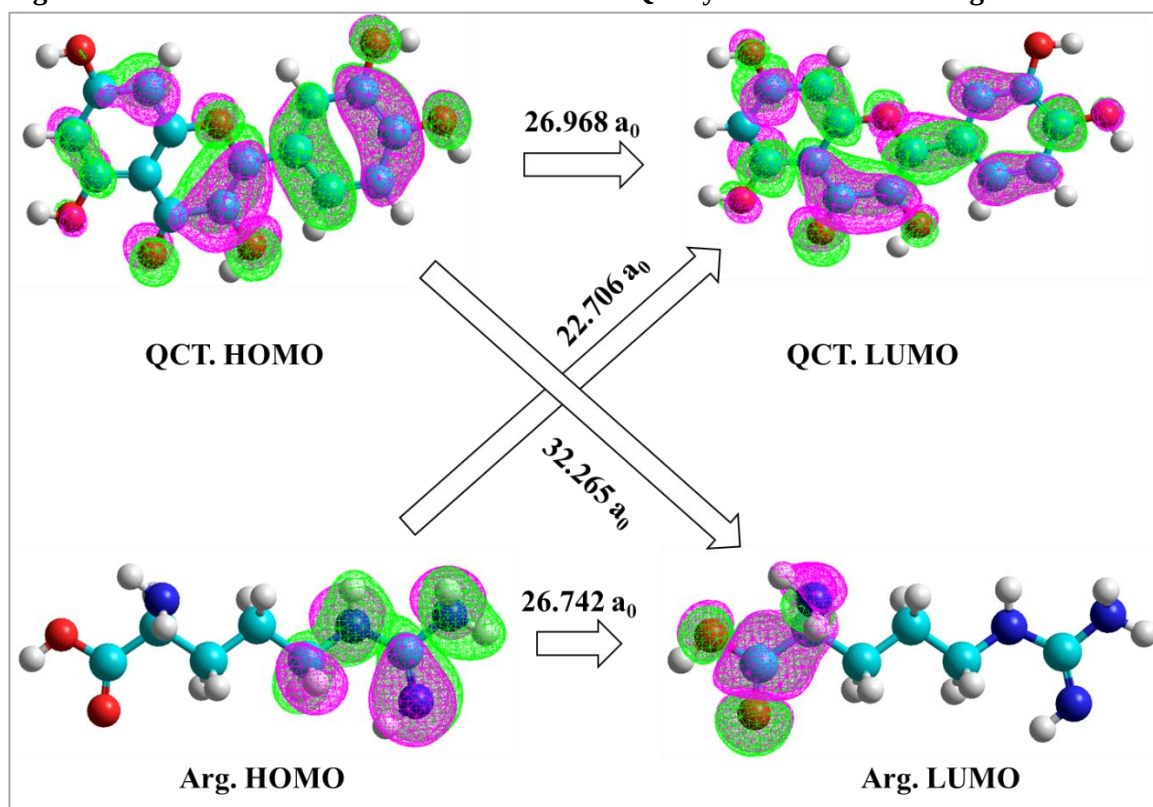


(vibrando). La energía que tienen que vencer es la BP, en el caso de la interacción 1 es de 8.424 eV (que es la mínima). La energía que actúa como fuerza electromotriz es el PE. De aquí se obtiene algo parecido a la longitud del resorte, que en este caso es de 22.706 radios de Bohr (a_0).

De la misma forma se calculan todas las interacciones posibles Redox. El resorte más pequeño, menos estirado es la interacción 1, donde el LUMO de la QCT absorbe nube electrónica del HOMO de la Arg, oxidándola.

En palabras sencillas, el electrón salta del HOMO de la Arg, salta al LUMO de la QCT, por la BP de menor impedancia. Si se toma como ley de Kirchhoff.

Figura 3. Bandas cruzadas entre una molécula de QCT y una molécula de Arg



CONCLUSIONES

Objetivo

El objetivo de esta investigación fue analizar la QCT en Jamaica (*Hibiscus sabdariffa*) mediante Química Cuántica: Estructura, Propiedades y Aplicaciones. Se logró.

Hipótesis

La QCT interactúa con los veinte AAs del cuerpo humano oxidándolos. Es decir, la QCT es un agente oxidante de los veinte AAs que constituyen al cuerpo humano, solos o secuenciados como proteínas.

Tesis.

Si, in silico se demuestra que la QCT es un agente oxidante poderoso de los veinte AAs del cuerpo humano (figuras 1 y 2, tabla 1).

Corolario (hallazgos que no estaban en los objetivos).

La fem es equivalente al PE cuántico.

El electrón salta por la BP más pequeña siguiendo el principio de mínima acción.

En este caso la interacción 1, es decir, la más afín, más poderosa y probable es cuando el HOMO de la Arg, proporciona por lo menos un electrón al LUMO de la QCT.

Conflicto de intereses

No hay conflicto de intereses entre los autores y autoras.

REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

- Alizadeh SR, Ebrahimzadeh MA. Quercetin derivatives: Drug design, development, and biological activities, a review. Eur J Med Chem. 2022 Feb 5;229:114068. doi: 10.1016/j.ejmech.2021.114068. Epub 2021 Dec 24. PMID: 34971873.
- Cjuno, J., & Arroyo, J. (2003). La química teórica y la química cuántica computacional. Boletín CSI, 48, 16-19.
- Cui Z, Zhao X, Amevor FK, Du X, Wang Y, Li D, Shu G, Tian Y, Zhao X. Therapeutic application of quercetin in aging-related diseases: SIRT1 as a potential mechanism. Front Immunol. 2022 Jul 22;13:943321. doi: 10.3389/fimmu.2022.943321. PMID: 35935939; PMCID: PMC9355713.
- Fiallos, K. Z. L., & Sánchez, B. O. Z. (2024). Avances en modelos in silico para el descubrimiento rápido de fármacos: transformando la farmacología computacional. AlfaPublicaciones, 6(2), 127-151.
- Garduño, J. G., Álvarez, R. G., Pacheco, J. L. C., Espinosa, L. R., & Medina, F. R. A. (2025). Citotoxicidad de la quercetina y su efecto sobre el transporte celular de glucosa. Acta Pediátrica de México, 46(1), 14-23.



- González-Pérez, M. (2017). A) Quantum Theory of the Electron Transfer Coefficient. *International Journal of Advanced Engineering, Management and Science*, 3(10), 239932.
- González-Pérez, M. (2017). B) Quantum modeling to determine the carcinogenic potential of aflatoxin B1 produced by *Aspegillus* sp and its metabolic derivate aflatoxin M1. *Mexican Journal of Biotechnology*, 2(2), 255-270.
- Hosseini A, Razavi BM, Banach M, Hosseinzadeh H. Quercetin and metabolic syndrome: A review. *Phytother Res*. 2021 Oct;35(10):5352-5364. doi: 10.1002/ptr.7144. Epub 2021 Jun 8. PMID: 34101925.
- Molina, F. H. (2021). COLLEJAS EN EL JARDIN. *La Cocina al Rescate de los Cultivos Olvidados*, 64.
- Montaño Arango, O., Corona Armenta, J. R., Ortega Reyes, A. O., & Garnica González, J. (2024). La flor de jamaica como producto estratégico para la salud humana en el contexto de México. *Inter disciplina*, 12(33), 117-142.
- Morales, C. O. (2020). Origen, historia natural y usos de las plantas introducidas en Costa Rica. *Cuadernos de Investigación UNED*, 12(2), 274-399.
- Moreno Ceballos, A., & MORENO CEBALLOS, A. N. D. R. E. A. (2024). Estudio computacional de la interacción y reactividad de fármacos con posible actividad contra la tuberculosis. Repositorio BUAP, Puebla México.
- Pérez, M. G., Soria, V. R., & Mioni, L. C. (2019). Demonstration of the Formation of the Caffeine-Dichloromethane-water Emulsion using Quantum Chemistry. *International Journal of Advanced Engineering, Management and Science*, 4(11), 268276.
- Pérez, M. G., Álvarez, A. M., Rodríguez, Y. E. S., Dircio, D. L. P., Cortés, A. Y. L., Fernández, V. H., ... & Castillo, E. G. (2024). Análisis de los Efectos de las Interacciones del Dióxido de Azufre y las Biomoléculas Humanas Estructurales, Usando Química Cuántica. *Ciencia Latina Revista Científica Multidisciplinar*, 8(4), 11803-11816.
- Poater, J. (2024). Diseño computacional de macrociclos más cooperativos inspirados por cuádruplexes de guanina. *Actualidad en farmacología y terapéutica*, 22(4), 264-266.
- Portillo Torres, A. L. (2020). Elucidación y efecto in vitro e in vivo de compuestos antimicrobianos de



- jamaica (*Hibiscus sabdariffa*) sobre la célula bacteriana. Repositorio Institucional del Tecnológico Nacional de México (RI - TecNM). Tesis de Posgrado Guanajuato Instituto Tecnológico de Celaya Tesis de Doctorado Doctorado en Ciencias en Ingeniería Bioquímica.
- Qi W, Qi W, Xiong D, Long M. Quercetin: Its Antioxidant Mechanism, Antibacterial Properties and Potential Application in Prevention and Control of Toxipathy. *Molecules*. 2022 Oct 3;27(19):6545. doi: 10.3390/molecules27196545. PMID: 36235082; PMCID: PMC9571766.
- Rodríguez-Castellanos, C. (2025). *±o Internacional de la Ciencia y la Tecnología Cuñtica*. *Anales de la Academia de Ciencias de Cuba*, 15(1), 2911.
- Sánchez, G. H., & Lorenzo, M. G. (2025). El lugar de la Química entre las Ciencias y la Tecnología. *Educación en la Química*, 31(01), 1-5.
- Yang D, Wang T, Long M, Li P. Quercetin: Its Main Pharmacological Activity and Potential Application in Clinical Medicine. *Oxid Med Cell Longev*. 2020 Dec 30;2020:8825387. doi: 10.1155/2020/8825387. PMID: 33488935; PMCID: PMC7790550.

