



**Congreso Argentino de Fisicoquímica y  
Química Inorgánica - La Plata 2021**



## XXII CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA Y QUÍMICA INORGÁNICA LA PLATA 2021

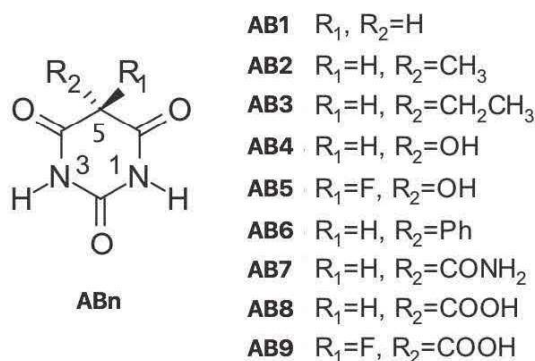
### MODULACIÓN DE LA AFINIDAD POR ANIONES CLORURO DEL ÁCIDO BARBITÚRICO

Petelski, Andre N.,<sup>1</sup> Marquez, Josefina;<sup>1</sup> Pamies, Silvana C.,<sup>1</sup> Sosa, Gladis Laura<sup>1</sup> y Peruchena, Nélica M.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Grupo UTN de Investigación en Química Teórica y Experimental. Departamento de Ingeniería Química. Facultad Regional Resistencia. Universidad Tecnológica Nacional. French 414 (H3500CHJ), Resistencia, Chaco, Argentina.

<sup>2</sup>Instituto de Química Básica y Aplicada del Nordeste Argentino, IQUIBA-NEA, UNNE-CONICET. Avenida Libertad 5460, 3400 Corrientes, Argentina.  
npetelski@frre.utn.edu.ar

**Introducción:** El ácido barbitúrico (AB) y sus derivados han sido utilizados en la química de coordinación debido a tres características claves: múltiples sitios de unión, la presencia de un C especialmente ácido y la posibilidad de modificarlo covalentemente en la posición 5.<sup>1</sup> Sin embargo, sus capacidades para reconocer aniones permanecen poco exploradas. El objetivo de este trabajo es así estudiar y entender las interacciones iónicas del AB, y una serie de derivados (ver **Figura 1**), con el anión cloruro. **Resultados:** Los cálculos DFT-D realizados al nivel BLYP-D3(BJ)/aug-cc-pVDZ permitieron identificar cuatro modos capaces de reconocer al anión. Las interacciones de coordinación pueden ser, además, finamente moduladas mediante los grupos R<sub>1</sub> y R<sub>2</sub>.



**Figura 1.** Estructura molecular del ácido barbitúrico (AB1) y de los derivados estudiados

**Conclusiones:** Los enlaces C–H tienen una capacidad de coordinación casi tan fuerte como la de los enlaces N–H. Asimismo, los compuestos **AB7** y **AB9** demostraron una mayor afinidad por el anión. De esta manera, los barbitúricos constituyen fragmentos potencialmente útiles para el diseño de receptores aniónicos.

#### Referencias

- 1) Mahmudov, K. T.; Kopylovich, M. N.; Maharramov, A. M.; Kurbanova, M. M.; Gurbanov, A. V.; Pombeiro, A. J. L. *Coord. Chem. Rev.*, **2014**, 265, 1–37