



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



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

### AVANCES SOBRE LA FOTOQUÍMICA DE LOS FENAMATOS

Gutiérrez Eduardo L.<sup>1,2\*</sup>, Miskoski Sandra<sup>3</sup>, Massad Walter<sup>3</sup>, Montaña Paulina<sup>1</sup>, Ferrari Gabriela<sup>1</sup>

<sup>1</sup> INQUISAL-CONICET, San Luis, Argentina – Área de Química Física, Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia, Universidad Nacional de San Luis, Chacabuco y Pedernera 5700, San Luis, Argentina.

<sup>2</sup> Área de Química Orgánica, FQByF, UNSL, Chacabuco y Pedernera 5700, San Luis, Argentina.

<sup>3</sup> Instituto para el Desarrollo Agroindustrial y de la Salud (IDAS). CONICET – UNRC. Dpto. de Química – FCEF-QyN - Universidad Nacional de Río Cuarto, 5800, Río Cuarto, Argentina

\* [egutierrez@unsl.edu.ar](mailto:egutierrez@unsl.edu.ar)

**Introducción:** los fenamatos (Fs), antiinflamatorios no esteroides (AINEs) derivados del ácido antranílico, utilizados en medicina humana y veterinaria, y postulados como neuroprotectores en modelos de roedores<sup>1</sup>, han sido clasificados como *nuevos contaminantes emergentes* por su presencia en cuerpos de aguas superficiales en distintas ciudades del mundo<sup>2</sup>. El estudio de las interacciones de los Fs con especies reactivas de oxígeno (EROs) generadas por fotosensibilización permitirá (1) evaluar el potencial rol de los Fs como antioxidantes en situaciones de estrés oxidativo<sup>3</sup>, (2) conocer sus posibles transformaciones en ambientes naturales acuáticos bajo irradiación natural<sup>2</sup>, y (3) diseñar alternativas para su degradación y eliminación de aguas residuales mediante procesos fotosensibilizados<sup>4</sup>.

**Resultados:** hemos determinado las constantes bimoleculares de desactivación total ( $k_t$ ) y reactiva ( $k_r$ ) de oxígeno molecular singlete ( $O_2(^1\Delta_g)$ , generado utilizando Rosa de Bengala como sensibilizador) por Fs (**Tabla 1**). Asimismo, hemos avanzado sobre el estudio del sistema fotosensibilizado Fs/riboflavina (RF), estimando las constantes bimoleculares de desactivación ( $^3k_q$ ) del estado  $^3RF^*$  por Fs (**Tabla 1**). Las aminas aromáticas son conocidos desactivadores de los estados  $^1RF^*$  y  $^3RF^*$  por transferencia electrónica ( $eT$ )<sup>5-6</sup>. En este sentido, los datos estimados a partir de la ecuación de Rehm-Weller<sup>5-6</sup> muestran que la  $eT$  sería termodinámicamente favorable ( $\Delta G^\circ_{eT} < 0$ ) para los Fs actuando como donores y RF como aceptor de electrones.

**Tabla 1.** Constantes cinéticas bimoleculares de los procesos fotosensibilizados

Fenamatos	$k_r / L \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$	$k_t / L \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$	$k_r/k_t$	$^1k_q / L \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$	$^3k_{q,ap} / L \text{ mol}^{-1} \text{ s}^{-1}$
Ác. fenámico (FEN)	$1,97 \times 10^7$	$3,03 \times 10^7$	0,65	No detectada	$1,97 \times 10^{10}$
Ác. flufenámico (FLUF)	$1,67 \times 10^7$	$1,84 \times 10^7$	0,91	No detectada	$1,83 \times 10^{10}$
Ác. mefenámico (MEF)	$2,59 \times 10^7$	$9,37 \times 10^7$	0,28	No detectada	$0,86 \times 10^{10}$
Ác. tolfenámico (TOLF)	$1,48 \times 10^7$	$3,22 \times 10^7$	0,46	No detectada	$1,36 \times 10^{10}$

**Conclusiones:** la contribución de mecanismos de desactivación reactiva de  $O_2(^1\Delta_g)$  por Fs puede ser evaluada en función del cociente  $k_r/k_t$ . MEF presenta el menor de estos cocientes, por lo cual sería en principio el más eficiente en un potencial rol como antioxidante frente a  $O_2(^1\Delta_g)$ , ya que el proceso de desactivación sería predominantemente físico. Por el contrario, FLUF, FEN y TOLF presentan mayores contribuciones reactivas, y serían más susceptibles de ser oxidados por  $O_2(^1\Delta_g)$ , lo cual representaría una alternativa para su degradación fotosensibilizada en procesos de remediación de aguas residuales. Las  $^3k_q$  estimadas se encuentran próximas al control difusional, indicando una desactivación muy eficiente de  $^3RF^*$  por fenamatos. La  $eT$  podría ser la vía de desactivación de  $^3RF^*$  por Fs como lo muestran los cálculos termodinámicos teóricos preliminares.

**Referencias** 1) Daniels, M. J. D., *Nat. Commun.* **2016**, 7, 12504. 2) Davis, C. A. *Environ. Sci.: Processes Impacts.* **2017**, 19, 656-665. 3) Dumont, M. *Free Radic. Biol. Med.* **2011**, 51(5), 1014-1026. 4) Koumaki, E. *Chemosphere.* **2015**, 138, 675-681. 5) Porcal, G. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2003**, 5, 4123-4128. 6) Martínez-Haya, R. *EurJOC.* **2017**, 2164-2169.

Libro de Actas : XXII Congreso Argentino de Fisicoquímica y Química Inorgánica : XXII CAFQI / Robert Marc... [et al.] ; compilado por María Paula Badenes... [et al.]. - 1a ed. - La Plata : Universidad Nacional de La Plata. Facultad de Ingeniería, 2021.

Libro digital, PDF

Archivo Digital: descarga y online

**ISBN 978-950-34-1999-1**

1. Química Inorgánica. I. Marc, Robert. II. Badenes, María Paula, comp.

CDD 546.071