



XX Congreso Argentino de Fisicoquímica y Química Inorgánica

Néstor M. Correa y Luis A. Otero

Compiladores

16 al 19 de Mayo de 2017

Ciudad de Villa Carlos Paz, Córdoba, Argentina

XX Congreso Argentino de Fisicoquímica y Química Inorgánica / Néstor Mariano Correa ... [et al.] ; compilado por Néstor Mariano Correa ; Luis Alberto Otero ; ; coordinación general de Néstor Mariano Correa ; Luis Alberto Otero. - 1a ed. - Río Cuarto : UniRío Editora, 2017.
Libro digital, PDF/A - (Académico científica)

Archivo Digital: descarga y online
ISBN 978-987-688-210-1

1. Física. 2. Química. 3. Química Inorgánica. I. Correa, Néstor Mariano II. Correa, Néstor Mariano, comp. III. Otero, Luis Alberto, comp. IV. Correa, Néstor Mariano, coord. V. Otero, Luis Alberto, coord.
CDD 540

XX CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUIMICA Y QUIMICA INORGÁNICA

16 al 19 de Mayo de 2017

Néstor M. Correa y Luis a. Otero (*Compiladores*)

2017 © by UniRío editora. Universidad Nacional de Río Cuarto
Ruta Nacional 36 km 601 – (X5804) Río Cuarto – Argentina
Tel: 54 (358) 467 6309
editorial@rec.unrc.edu.ar
www.unrc.edu.ar/unrc/editorial.cdc

ISBN 978-987-688-210-1

Primera Edición: *Abril de 2017*



Este obra está bajo una Licencia Creative Commons Atribución 2.5 Argentina.

http://creativecommons.org/licenses/by/2.5/ar/deed.es_AR



Uni. Tres primeras letras de “Universidad”. Uso popular muy nuestro; la Uni. Universidad del latín “universitas” (personas dedicadas al ocio del saber), se contextualiza para nosotros en nuestro anclaje territorial y en la concepción de conocimientos y saberes contruidos y compartidos socialmente.

El río. Celeste y Naranja. El agua y la arena de nuestro Río Cuarto en constante confluencia y devenir.

La gota. El acento y el impacto visual: agua en un movimiento de vuelo libre de un “nosotros”.

Conocimiento que circula y calma la sed.

Consejo Editorial

Facultad de Agronomía y Veterinaria
Prof. Laura Ugnia y Prof. Mercedes Ibañez

Facultad de Ciencias Económicas
Prof. Ana Vianco y Prof. Gisela Barrionuevo

Facultad de Ciencias Exactas, Físico-Químicas
y Naturales
Prof. Sandra Miskoski y Prof. Julio Barros

Facultad de Ciencias Humanas
Prof. Pablo Dema

Facultad de Ingeniería
Prof. Jorge Vicario

Biblioteca Central Juan Filloy
Bibl. Claudia Rodríguez y Prof. Mónica Torreta

Secretaría Académica
Prof. Ana Vogliotti y Prof. José Di Marco

Equipo Editorial

Secretaria Académica: *Ana Vogliotti*

Directora: *José Di Marco*

Equipo: *José Luis Ammann, Daila Prado, Maximiliano Brito, Ana Carolina Savino
y Daniel Ferniot*

LIBRO DE RESUMENES



ESTUDIO EXPERIMENTAL Y TEÓRICO DEL COMPLEJO Fisetina-Cu(II)

Muñoz Vanesa^{1,2}, Sancho Matías^{1,3}, Ferrari Gabriela^{1,2}, Dimarco Palencia Frida^{1,2} García Norman⁴, Montaña M. Paulina^{1,2}

¹Área de Química Física, FQBF-UNSL, Lavalle 1155 (5700) San Luis, Argentina

²INQUISAL (CONICET-UNSL), Alte. Brown 907 (5700) San Luis, Argentina.

³IMIBIO-SL (CONICET-UNSL), Ejército de los Andes 950 (5700), San Luis, Argentina

⁴Departamento de Química, UNRC, (5800) Río Cuarto, Argentina

mpaulina.monta.a@gmail.com

Motivación

Los flavonoides son compuestos polifenólicos distribuidos en ambientes naturales, y que pueden obtenerse también por síntesis. Entre ellos se encuentra Fisetina (F), un flavonol con efectos antivirales, anticarcinogénicos, antiinflamatorios, etc. Se ha observado en diversos estudios que la complejación con iones metálicos podría afectar la bioactividad de los flavonoides. Como primer paso para determinar si las propiedades de este compuesto se ven afectadas por la presencia de iones metálicos, se propuso estudiar el sistema F-Cu(II), determinando la constante aparente de equilibrio de complejación (K) en medio etanólico. El ión metálico fue seleccionado dado que juega un importante rol como cofactor en sistemas vivos. El estudio se realizó tanto en forma experimental como teórica.

Resultados

La formación del complejo F-Cu se puede observar inmediatamente ya que se produce una intensificación del color original de la solución, lo que corresponde a un corrimiento de la banda centrada en 364 nm del ligando a mayores longitudes de onda. Simultáneamente se observa la aparición de una nueva banda a 430 nm, atribuible al complejo.

La estequiometría y el valor de K experimental se determinaron mediante el método de Job. La constante de formación teórica (K_{CT}) para F-Cu se evaluó a través de cálculos DFT y, dado que F presenta dos sitios posibles de quelación por Cu(II), se propusieron dos posibles estructuras para el complejo. Los espectros UV-Vis de los complejos, simulados en base a los resultados TD-DFT empleando diferentes funcionales, fueron caracterizados a través de un análisis de Orbitales Naturales de Transición. Se observó una muy buena correlación entre los espectros FTIR y UV-Vis simulados y experimentales para el complejo y el ligando libre, por lo que pudo determinarse el sitio de preferencia en el cual se produce la complejación.

Conclusiones

Se estudió la formación del complejo F-Cu en medio etanólico. Se determinó la estequiometría siendo 1:1 ligando:metal y la constante aparente de formación a 25°C obteniéndose un valor de $7,8 \times 10^5$. Los cálculos TD-DFT sugieren que para F el grupo catecol del anillo B es el sitio de preferencia para la quelación bajo las condiciones adoptadas.