

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE COMPUESTOS DE COORDINACIÓN DEL ÁCIDO 3-HIDROXIQUINURÉNICO CON LANTÁNIDOS (La, Eu, Tb)

Eduardo M. Rustoy,^{a,b} María S. Shmidt,^c María I. Abasolo,^c María C. García Vior,^c Sergio D. Ezquerra Riega,^a Juan M. Lázaro Martínez^c y María M. Blanco^c

^a UMYMFOR-CONICET, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, UBA, Ciudad Universitaria, CABA, ^b Depto de Ciencias. Básicas, UNLu, RN 5 y Av. Constitución, Luján, ^c Departamento de Química Orgánica, Facultad de Farmacia y Bioquímica, UBA, Junín 956, CABA Argentina. mblanco@ffyb.uba.ar

Introducción: Los compuestos de coordinación de diferentes lantánidos encuentran aplicación en distintas áreas de las ciencias aplicadas y tecnología. Por ejemplo, ciertos complejos de Eu (III) son utilizados en la técnica de diagnóstico denominada imágenes inducidas por luminiscencia (IL, Eu³⁺). Otros derivados del Tb (III) encontraron aplicación en el área de la fabricación de sensores en estado sólido mientras que, los complejos derivados de ácido quinurénico y La (III) han comenzado a ser estudiados por sus propiedades catalíticas y antibacterianas. En vista de la información anteriormente expuesta se propuso sintetizar y caracterizar estructuralmente los compuestos de coordinación del ácido 3-hidroxiquinurénico con Eu(III), Tb(III) y La(III).

Resultados: Los compuestos de coordinación fueron sintetizados y caracterizados por espectroscopía de IR y RMN, y análisis elemental. Debido a la imposibilidad de obtener cristales de calidad suficiente para ser analizados por difracción de rayos X, se realizaron estudios computacionales con el fin de establecer las geometrías de los complejos sintetizados. Dichas geometrías son función del radio iónico efectivo del catión utilizado, esta propiedad está directamente relacionada con el número de coordinación (CN) del centro metálico. En general los lantánidos tienen un CN= 9, sin embargo el La (III) en particular, puede mostrar un CN= 9 o 12 en general. En base a los datos experimentales (espectros de IR y ¹H-RMN y análisis elemental) se propusieron diferentes posibles estructuras, las cuales fueron sometidas a los cálculos computacionales. Posteriormente, se calcularon los espectros IR (teóricos), los cuales fueron comparados con los obtenidos experimentalmente. De esta manera por ejemplo, se pudo concluir que para el compuesto de coordinación derivado de La(III) el CN= 12, donde el centro metálico se encuentra coordinado a tres moléculas de ácido 3-hidroxiquinurénico y seis moléculas de agua (Figura 1).

