

# DETERMINACIÓN DE PARÁMETROS TERMODINÁMICOS Y CINÉTICOS DE LA REACCIÓN DE COMPLEJACIÓN DE QUERCETINA Y Al(III)

Frida C. D. Dimarco, Vanesa A. Muñoz, Gabriela V. Ferrari y M. Paulina Montaña

Área de Química Física – Instituto de Química de San Luis INQUISAL  
(CONICET- UNSL)

Lavalle 1155 – 5700 – San Luis, Argentina.

e-mail: [mpaulina@unsl.edu.ar](mailto:mpaulina@unsl.edu.ar)

## Introducción

Los flavonoides constituyen un importante grupo de compuestos polifenólicos formado por chalconas, flavanonas, flavonas, entre otros. Estos flavonoides pueden obtenerse a partir de órganos de numerosas especies de plantas y por medio de variados procedimientos de síntesis. La estructura, reactividad y bioactividad de estas sustancias han despertado el interés en diversas áreas científicas.

En particular, las flavonas presentan una interesante capacidad para complejar iones metálicos, la cual es muchas veces usada para determinar el contenido total de flavonoides en extractos vegetales.

Para el presente estudio se eligió la flavona Quercetina (Figura 1), de origen comercial, para estudiar la cinética de reacción frente al ión metálico Al (III).

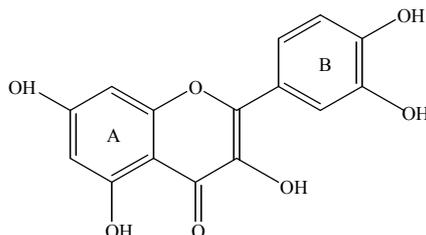


Figura 1. Estructura molecular de Quercetina.

## Resultados y Conclusiones

El espectro de absorción UV-Vis de la flavona exhibe dos bandas de absorción características, las cuales están relacionadas a las transiciones  $\pi \rightarrow \pi^*$  en el sistema de tres anillos aromáticos de las mismas. La banda que aparece entre 300 y 400 nm (Banda I) corresponde a la absorción del anillo B (sistema cinamoílo) mientras que la ubicada en la zona comprendida entre 250 a 300 nm (Banda II) está asociada a la absorción del anillo A (sistema benzoílo).

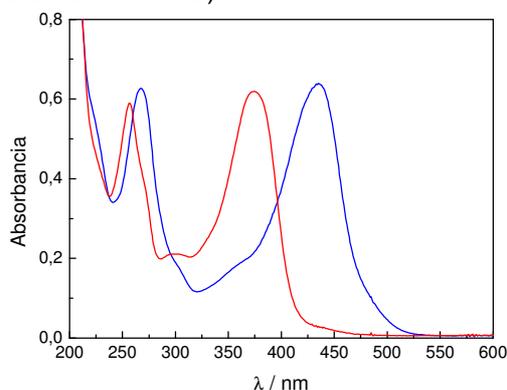


Figura 2. Espectros de absorción de Quercetina (rojo) y Quercetina-Al(III) (azul).

Del análisis de los espectros de absorción de la flavona libre y flavona-ión metálico es posible inferir la formación del complejo metálico en medio etanólico (Figura 2).

Mediante el uso de técnicas espectrofotométricas se evaluó la estequiometría<sup>1,2</sup> del complejo Quercetina-Al(III), presentando una relación Ligando/Metal 2:1 (Figura 3). A continuación se evaluó la constante aparente de formación<sup>3</sup> a diferentes temperaturas (10, 15, 25 y 30 °C), utilizando un espectrofotómetro de absorción UV-Vis Agilent 8453 provisto de un sistema Peltier para control de la temperatura (Figura 4).

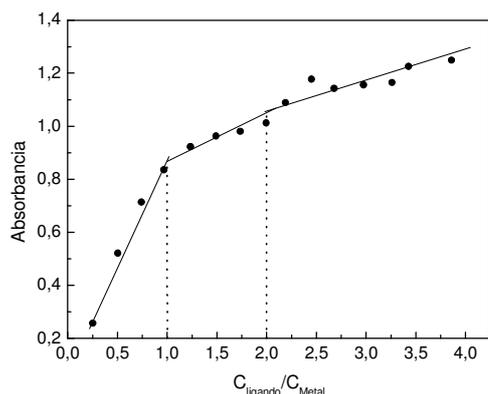


Figura 3. Determinación de la estequiometría del complejo Quercetina-Al(III).

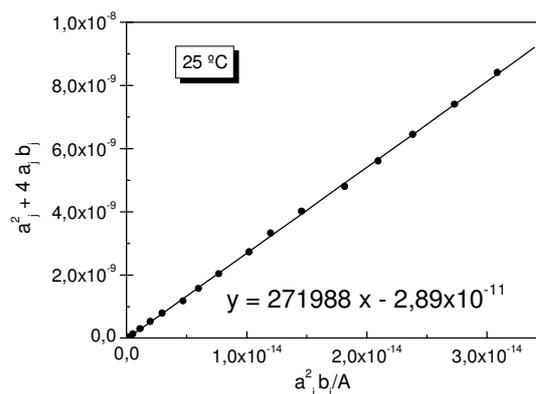


Figura 4. Evaluación de la constante aparente de formación de Quercetina-Al(III) a 25 °C.

En base a los resultados obtenidos se estimaron los parámetros termodinámicos para el sistema bajo estudio (Tabla 1).

Tabla 1. Valores de constantes aparentes de formación de Quercetina-Al(III) y de  $\Delta G$  para cada temperatura estudiada.

T / °C	K
15	$5,45 \times 10^{10}$
20	$5,14 \times 10^{10}$
25	$3,45 \times 10^{10}$
30	$1,34 \times 10^{11}$

Posteriormente se realizó un estudio sobre la velocidad de la reacción de complejación de Quercetina y Al (III). Se eligió trabajar en condiciones de pseudoprimer orden y así determinar la constante de velocidad a diferentes temperaturas<sup>4</sup>. La expresión cinética integrada para una reacción de primer orden en función de las absorbancias de las soluciones es:

$$\ln (A_{\infty} - A_n) = -k_I \cdot t + \ln (A_{\infty} - A_0)$$

De acuerdo con esta ecuación, si la gráfica de  $\ln (A_{\infty} - A_n)$  vs. tiempo es lineal resulta correcta la suposición de que  $n = 1$  (Figura 5). Además, a partir de la pendiente resultante de la recta se calcula  $k$  y de la ordenada al origen, el valor  $A_0$ .

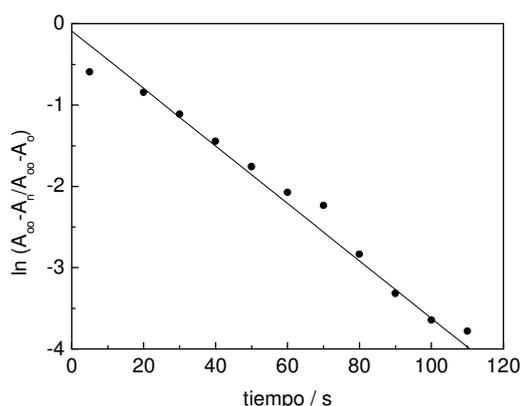


Figura 5. Determinación de la constante cinética de la reacción de Quercetina y Al(III) a 20 °C

Arrhenius descubrió empíricamente que la constante de velocidad  $k$  está relacionada a la temperatura absoluta  $T$  por la ecuación:

$$k = A \exp(-E_a/RT)$$

donde  $R$  es la constante general de los gases (8,314 J/ K mol) y  $E_a$  es la energía de activación. En la Tabla 2 se listan los valores de las constantes de velocidad obtenidas a las temperaturas ensayadas, cuya representación gráfica se muestra en la Figura 6.

Tabla 2. Valores de las constantes cinéticas para la reacción entre Quercetina y Al(III) a cada temperatura estudiada.

T / °C	k / s <sup>-1</sup>
15	0,0061
20	0,0328
25	0,0729

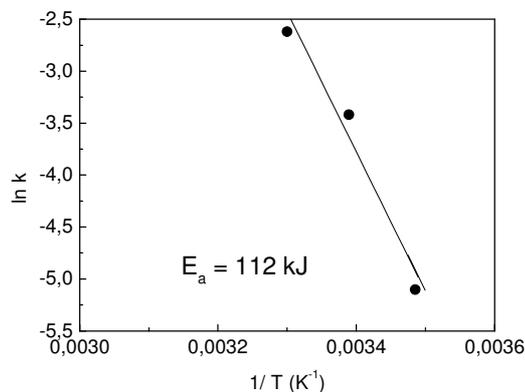


Figura 5. Representación de la ecuación de Arrhenius para el sistema Quercetina-Al(III).

## Referencias

- <sup>1</sup> Sawyer D.T. et al. *Chemistry Experiments for Instrumental Methods*. Ed John Wiley & Sons, EEUU, 1984.
- <sup>2</sup> Harris D.C., *Química Analítica Cuantitativa*, Ed. Reverté, España, 1991.
- <sup>3</sup> Debattista N.B. & Pappano N.B., *Complexant efficiency of 2'-hydroxy-4-R-chalcones for Aluminium (III) and substituent's effect*. *Talanta* 44: 1967-1971, 1997
- <sup>4</sup> Laidler K.J., *Cinética de Reacciones*, Editorial Alhambra, Madrid, 1972.