

ANÁLISIS COMPUTACIONAL APLICADO A LA CARACTERIZACIÓN DE UN COMPLEJO DE COBRE CON LAMIVUDINA

Facundo Tarasi¹, Axel Toledo², María Soledad Islas³

¹Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física/INQUIMAE, FCEyN, UBA, Intendente Güiraldes 2160, CABA, Argentina. ²CEQUINOR-CONICET-CICPBA-UNLP, FCE, UNLP, Bv. 120 N° 1465, 1900, La Plata, Argentina. ³Departamento de Química y Bioquímica, FCEyN, UNMdP, Funes 3350, Mar del Plata, Argentina.

Correo electrónico de contacto: msislas@mdp.edu.ar

La lamivudina es un inhibidor de la transcriptasa inversa utilizado principalmente en el tratamiento del VIH y la hepatitis B. Con el objetivo de potenciar su efecto biológico, se ha sintetizado y estudiado previamente un complejo cristalino con cobre(II), CuLami[1,2]. En este trabajo, se realizaron cálculos computacionales para respaldar y proponer nuevas asignaciones a los datos experimentales obtenidos mediante espectroscopías UV-vis y FTIR.

Las frecuencias vibracionales se calcularon usando la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) al nivel ω B97X-D4/def2-TZVP. Para el complejo CuLami, se partió de la estructura cristalina obtenida por difracción de rayos X [2]. En el caso de la lamivudina, fue necesario usar un clúster de 5 moléculas debido a la red de puentes de hidrógeno presente (Fig. 1a). Las frecuencias obtenidas, junto con sus corrimientos debido a la complejación, mostraron buena concordancia con las observadas mediante FTIR (Fig. 1b).

Las energías de las primeras transiciones electrónicas se calcularon mediante DFT dependiente del tiempo (TD-DFT), con acetonitrilo como solvente implícito. El análisis de orbitales naturales de transición (NTOs) indicó un estado fundamental $d_{x^2-y^2}$ para el complejo. Las longitudes de onda calculadas (693, 572, 542 y 541 nm) se correspondieron de forma excelente con las bandas anchas observadas mediante espectroscopía UV-vis centradas en 570 y 680 nm.

En conclusión, los cálculos computacionales proporcionaron una asignación confiable de los datos obtenidos mediante FTIR y UV-vis, apoyando la caracterización del complejo CuLami.

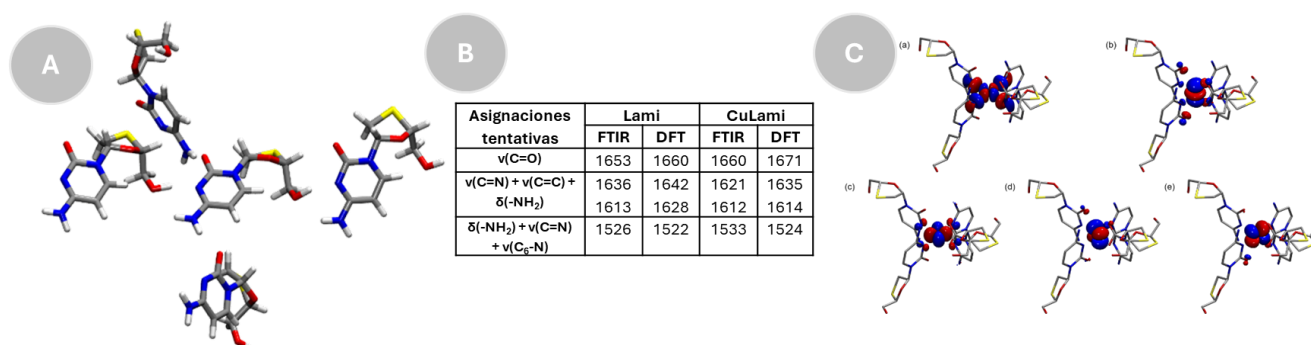


Figura 1: a) clúster de 5 lamivudinas, b) tabla de frecuencias FTIR experimentales y calculadas por DFT, c) Orbitales naturales de transición calculados para el complejo CuLami.

Referencias

- [1] Villa, C.; Cadavid, J.F., Toledo, A., Soria, D.B., Islas, M.S. *XXI Congreso Argentino de Fisicoquímica y Química Inorgánica*, **2019**, ISBN 978-987-754-185-4, 63.
 [2] Echeverría, G.A., Piro, O.E., CCDC 2362923, **2024**