

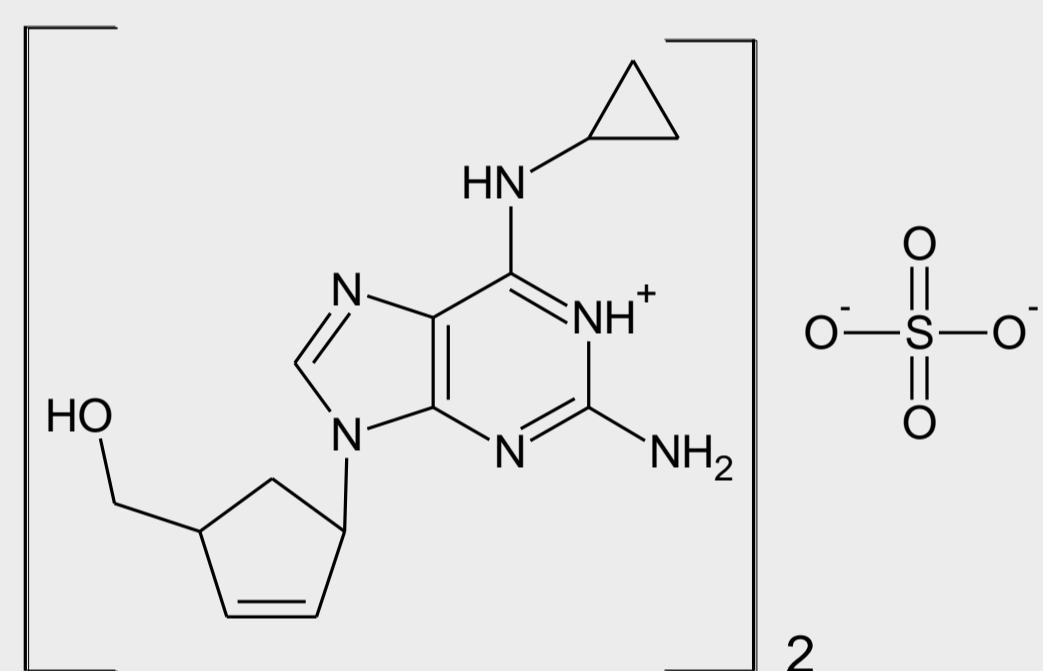
SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN POR FTIR Y UV-VIS DE UN COMPLEJO DE COBRE(II) CON ABACAVIR

Bonomi Fiamma¹, Cadavid, Juan²,
Almaraz Alejandra¹ e Islas Soledad^{1*}

¹Dpto. de Química y Bioquímica- FCEyN- UNMdP- Funes 3350 (7600 Mar del Plata). ²CEQUINOR (UNLP-CIC-CONICET) Bv. 120 1465 (1900 La Plata) *msislas@mdp.edu.ar

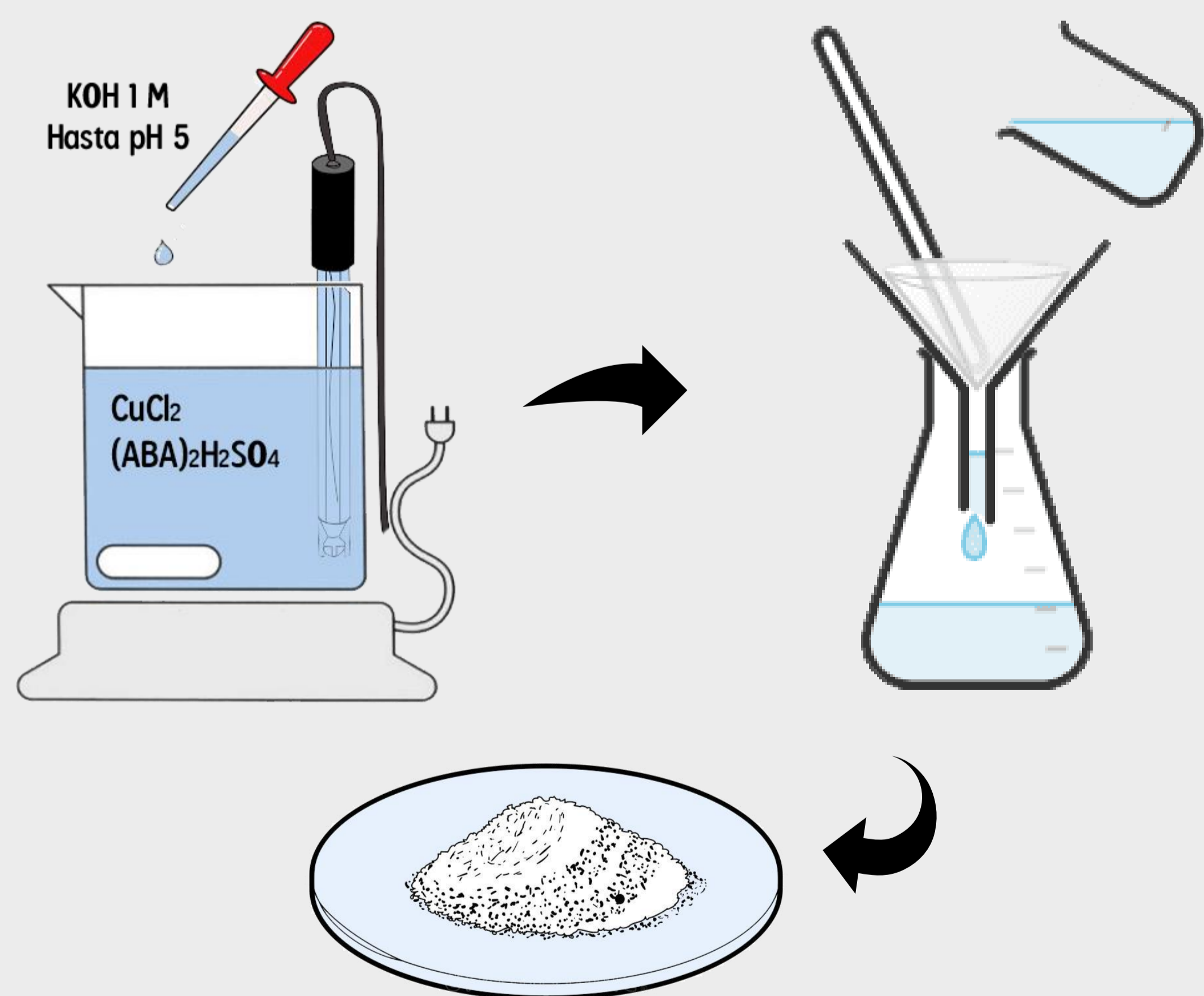
INTRODUCCIÓN

El abacavir (ABC), es un fármaco que se utiliza en el tratamiento contra el Virus de la Inmunodeficiencia Humana (VIH) debido a su poder inhibitorio sobre la transcriptasa inversa, impidiendo la replicación e infección del mismo [1]. Se comercializa como sulfato de abacavir $(ABC)_2 \cdot H_2SO_4$ y tiene un $pK_a=5,01$ [2]. Se busca obtener un complejo con cobre(II) y estudiar las posibles modificaciones de sus propiedades.



SÍNTESIS Y METODOLOGÍA

Se mezcló una solución acuosa de 0,2 mmoles de $(ABC)_2 \cdot H_2SO_4$ con 0,2 mmoles de $CuCl_2$ hasta un Vf de 10 mL. Con KOH 1M se llevó desde un pH inicial 3 hasta un pH=5. Se obtuvo un precipitado celeste que se filtró, lavó, secó y posteriormente se lo caracterizó por FTIR.



REFERENCIAS

- [1] Martin, M.A., Kroetz, D.L., *Pharmacotherapy*, 2013, 33(7), 765-775.
- [2] Goizman, M. S. *et al.*, *Pharmaceutical Chemistry Journal*, 2019, 53(9), 876-882.
- [3] Prenesti E. *et al.*, *Polyhedron*, 2006, 25, 2815-2823
- [4] Ganwar, S.K., *et al.*, *J. Biotech. and Biochem.*, 2016, 2(1), 1-16.

AGRADECIMIENTOS:

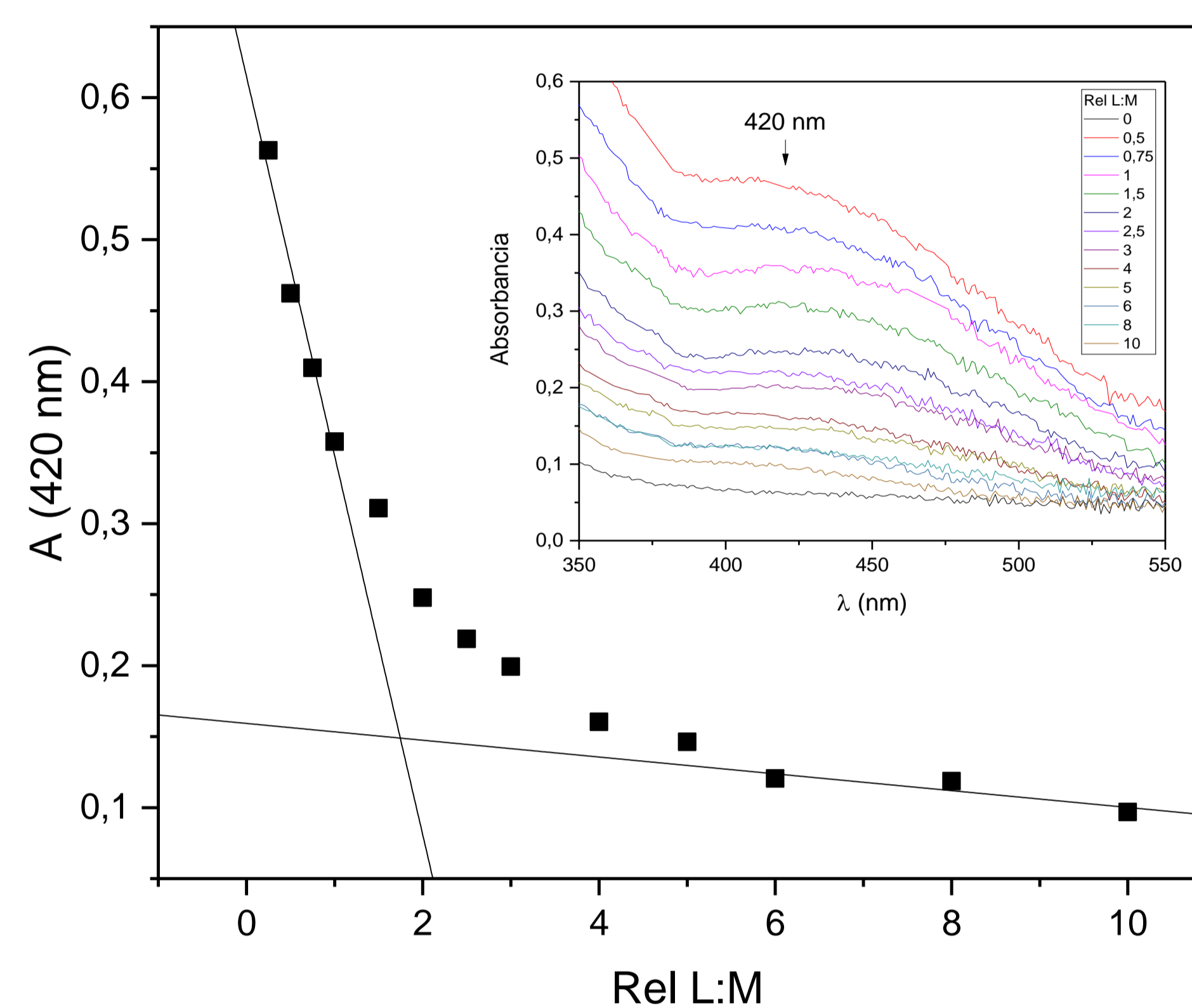
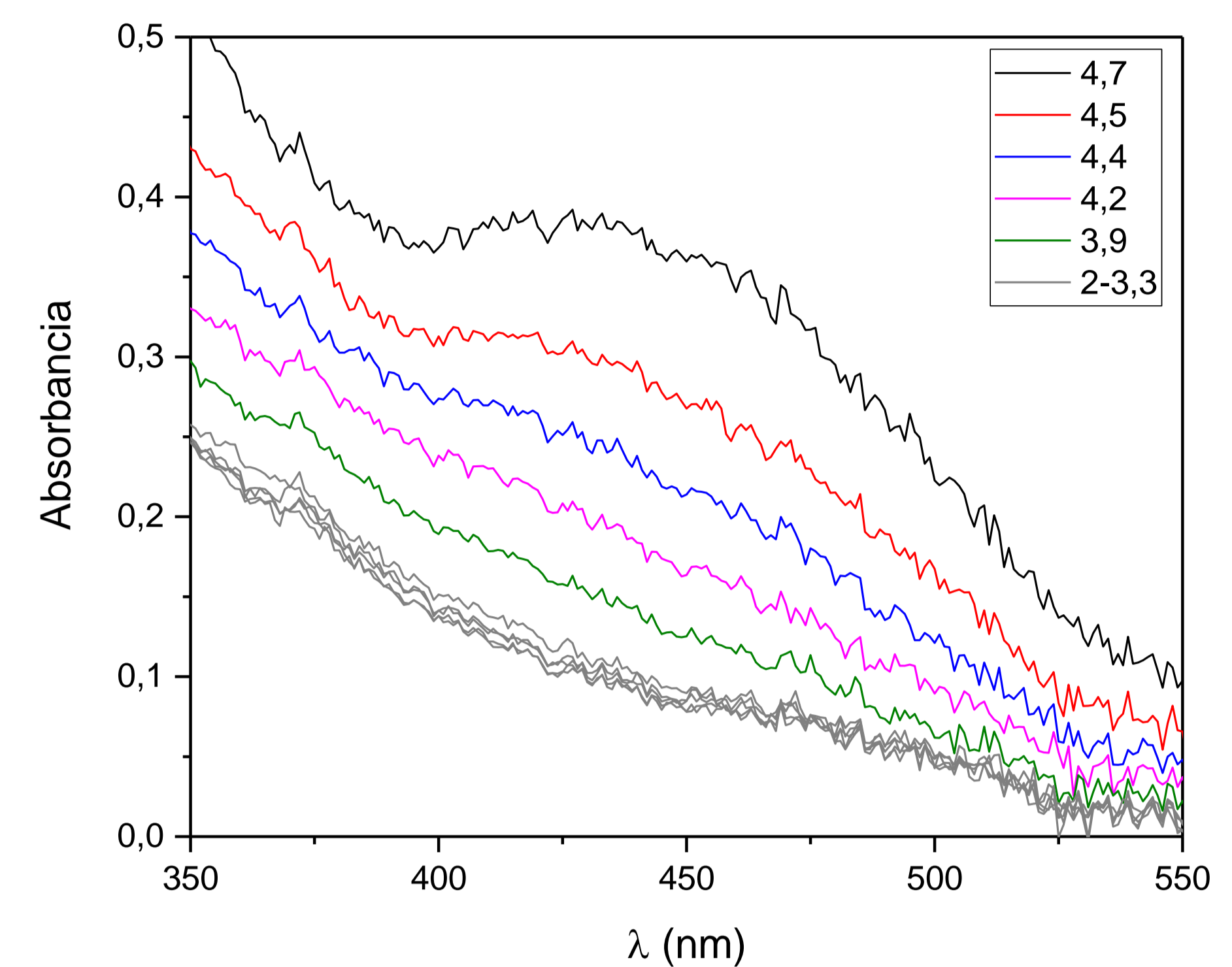
Proyecto de UNMdP EXA 920/19

RESULTADOS UV-vis

El espectro UV-vis del complejo en solución acuosa muestra dos bandas debido a transiciones d-d, una en 420 nm y otra en 788 nm. Se trabajó principalmente observando variaciones en la de 420 nm ya que en esa zona no interfiere el cobre libre. La ubicación de esta banda para el cobre a altas energías es indicativa de un entorno ecuatorial de coordinación rico en nitrógenos [3].

Variación con el pH

Se realizó una mezcla de soluciones acuosas de ABC y $CuCl_2$ en relación 2:1. El pH se varió agregando cantidades sucesivas de KOH. La mezcla pasó de color celeste, a verdoso, llegando a un color amarillento. En el espectro se observa que a pH mayores a 3,3 comienza a formarse el complejo ya que aumenta la intensidad de la banda de 420 nm. A pH por encima de 5 (pK_a del ABC) [2] se forma un precipitado color celeste.



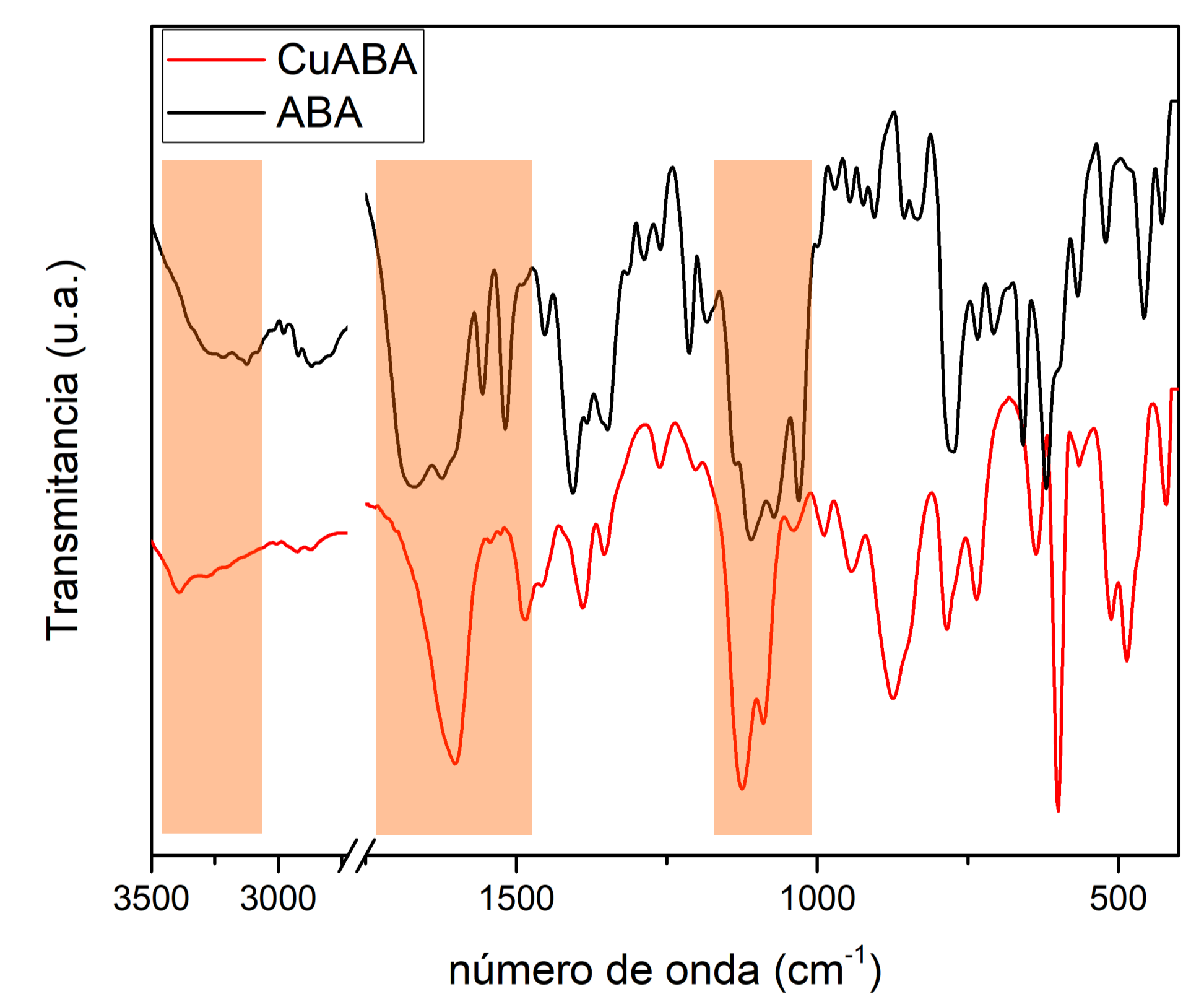
Titulación espectrofotométrica

Se partió de una solución acuosa de ABC a pH 5 y se agregaron cantidades crecientes de una solución acuosa de $CuCl_2$. Se registraron los espectros siguiendo la variación de la banda a 420 nm, obteniéndose una relación L:M de 2:1

RESULTADOS FTIR

Asignaciones tentativas (cm^{-1})	ABC	Cu-ABC
N-H y O-H	3350- 3124 (s, vb)	3390-3280 (s, vb)
C=C + otros modos	1647 (vs) 1617 (vs)	1604 (vs, b)
C=N + otros modos	1556 (m) 1518 (m)	1483 (m)
SO_4^{-2}	1110 (vs) 1071 (vs) 620 (s)	1125 (vs) 1089 (vs) 601 (s)

Entre paréntesis las intensidades, abreviaturas: vb: muy ancha, b: ancha, vs: muy fuerte, s: fuerte, m: media.



Se observaron corrimientos en bandas relacionadas a los estiramientos combinados del sistema aromático [4], principalmente C=C y C=N. Además se mencionan los cambios en frecuencias altas originados por la desprotonación del grupo NH y posterior coordinación con el metal. Se observa también la presencia del grupo sulfato con distintas simetrías en ambos compuestos en las bandas de alrededor de 1100 cm^{-1}

CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS FUTURAS

De acuerdo con lo observado por FTIR y UV-vis, se propone la formación de un complejo de cobre con abacavir en relación 2:1 con sulfato actuando como contraión. Se espera poder continuar con otros ensayos de caracterización, y la búsqueda de un monocristal que permita confirmar la estructura del complejo.

