



**Congreso Argentino de Fisicoquímica y
Química Inorgánica - La Plata 2021**

En memoria del Profesor
Dr. Alejandro Jorge Arvia
14/01/1928-22/04/2021

Comité Organizador

Presidente:

- Ing. Liliana M. Gassa

Vicepresidente:

- Dra. María Eugenia Tucceri

Secretaria:

- Dra. María Paula Badenes

Prosecretaria:

- Dra. Larisa Bracco

Tesorera:

- Dra. Carolina Vericat

Vocales:

- Dra. Carolina Lorente
- Dr. Ezequiel Wolcan
- Lic. Claudia Chacón Gil
- Lic. Valentín Villarreal
- Lic. Yoskiel Lorca
- Lic. Paolo Zucchini
- Dr. Fabricio Ragone
- Mag. Wilfred Espinosa
- Lic. Yeljair Monascal

Comité Científico

Presidente:

- Dra. Florencia Fagalde

Delegación UNS, Bahía Blanca:

- Dr. Juan Manuel Sieben
- Dra. Graciela Pilar Zanini
- Dra. Mariana Alvarez

Delegación CONEA, CAC – Buenos Aires:

- Dra. Verónica Lombardo
- Dr. Nahuel Montesinos

Delegación UNC, Córdoba:

- Dra. Belén Blanco
- Dr. Sergio Dassie
- Dr. Gustavo Pino

Delegación UNNE, Corrientes:

- Dra. Maria Fernanda Zalazar
- Dr. Emilio Luis Angelina (UNNE)

Delegación UNLP, La Plata:

- Dra. Andrea Lorena Picone
- Dra. Rosana Romano
- Dra. Melina Cozzarin
- Dr. Gustavo Ruiz

Delegación UNRC, Rio IV:

- Dr. Walter A. Massad
- Dr. Mariano Correa
- Dr. Rodrigo Palacios

Delegación UNR, Rosario, Santa Fé:

- Dr. Sebastián Bellú
- Dr. Juan Carlos Gonzalez

Delegación Santa Fé

- Dra. Claudia Neyertz

Delegación UNSL, San Luis:

- Dr. Germán Gómez
- Dra. Griselda Narda

Delegación UNSE, Santiago del Estero:

- Dra. Ana Ledesma
- Dra. Valentina Rey

Delegación Tucumán:

- Dra. Aída Ben Altabef
- Dr. Mauricio Cattaneo



XXII CONGRESO ARGENTINO DE FISICOQUÍMICA Y QUÍMICA INORGÁNICA LA PLATA 2021

MODULACIÓN DE LA AFINIDAD POR ANIONES CLORURO DEL ÁCIDO BARBITÚRICO

Petelski, Andre N.,¹ Marquez, Josefina;¹ Pamies, Silvana C.,¹ Sosa, Gladis Laura¹ y Peruchena, Nélica M.²

¹Grupo UTN de Investigación en Química Teórica y Experimental. Departamento de Ingeniería Química. Facultad Regional Resistencia. Universidad Tecnológica Nacional. French 414 (H3500CHJ), Resistencia, Chaco, Argentina.

²Instituto de Química Básica y Aplicada del Nordeste Argentino, IQIIBA-NEA, UNNE-CONICET. Avenida Libertad 5460, 3400 Corrientes, Argentina.
npetelski@frre.utn.edu.ar

Introducción: El ácido barbitúrico (AB) y sus derivados han sido utilizados en la química de coordinación debido a tres características claves: múltiples sitios de unión, la presencia de un C especialmente ácido y la posibilidad de modificarlo covalentemente en la posición 5.¹ Sin embargo, sus capacidades para reconocer aniones permanecen poco exploradas. El objetivo de este trabajo es así estudiar y entender las interacciones iónicas del AB, y una serie de derivados (ver **Figura 1**), con el anión cloruro. **Resultados:** Los cálculos DFT-D realizados al nivel BLYP-D3(BJ)/aug-cc-pVDZ permitieron identificar cuatro modos capaces de reconocer al anión. Las interacciones de coordinación pueden ser, además, finamente moduladas mediante los grupos R₁ y R₂.

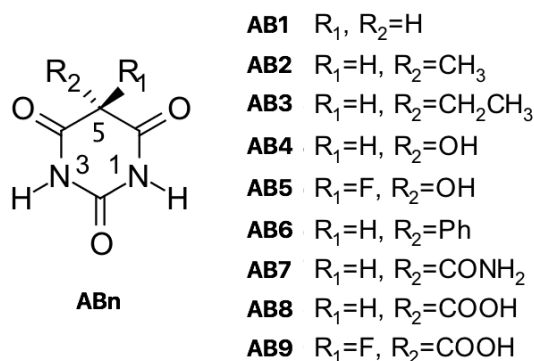


Figura 1. Estructura molecular del ácido barbitúrico (AB1) y de los derivados estudiados

Conclusiones: Los enlaces C–H tienen una capacidad de coordinación casi tan fuerte como la de los enlaces N–H. Asimismo, los compuestos **AB7** y **AB9** demostraron una mayor afinidad por el anión. De esta manera, los barbitúricos constituyen fragmentos potencialmente útiles para el diseño de receptores aniónicos.

Referencias

- 1) Mahmudov, K. T.; Kopylovich, M. N.; Maharramov, A. M.; Kurbanova, M. M.; Gurbanov, A. V.; Pombeiro, A. J. L. *Coord. Chem. Rev.*, **2014**, 265, 1–37