

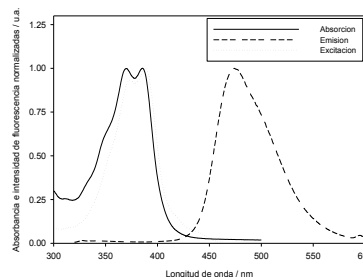
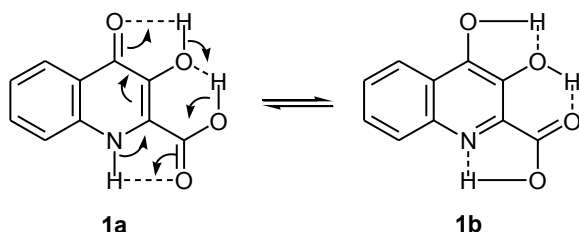
ÁCIDO 3-HIDROXIQUINURÉNICO: UN POTENCIAL SENSOR FLUORESCENTE BIOCOMPATIBLE

María S. Schmidt,^a María C. García Vior,^a Sergio D. Ezquerra Riega,^a Juan M. Lázaro Martínez,^a María I. Abasolo,^a Eduardo M. Rustoy,^b Isabel A. Perillo^a y María M. Blanco^a

^a Departamento de Química Orgánica, Facultad de Farmacia y Bioquímica, UBA, Junín 956, CABA, ^b UMYMFOR-CONICET, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, UBA, Ciudad Universitaria, CABA, Argentina. mblanco@ffybio.uba.ar

Introducción: Los métodos basados en sensores fluorescentes han sido muy utilizados en las últimas décadas generando un gran interés por el desarrollo de sondas fluorescentes, las cuales han sido utilizadas en el campo biológico, químico, ecológico e industrial. Las sondas fluorescentes en general, y particularmente aquellas que poseen estructuras heterocíclicas compatibles con sistemas biológicos, desempeñan un papel crucial para el estudio de procesos fisiológicos y bioquímicos mediante imágenes. Presentamos en esta comunicación las propiedades espectroscópicas en estado sólido y en solución del ácido 3-hidroxiquinurénico (**1**), un nuevo fluorocromo.

Resultados: Por poseer estructura de 4-quinolona, dicho ácido presenta posibilidades de equilibrio tautomérico **1a** ⇌ **1b** (Figura 1). Las tres uniones de hidrógeno intramoleculares asistidas por resonancia (efecto *RAHB*) que pueden establecerse, serían responsables de las particulares características fisicoquímicas observadas. Ante la dificultad para obtener monocristales adecuados para ser estudiados por difracción de rayos X, se hicieron experimentos de RMN en estado sólido (espectros de ¹³C CP-MAS, de edición NQS y CPPI y ¹H-¹³C HETCOR) que permitieron obtener información estructural importante. Se observó una única molécula por celda unidad, siendo la estructura carbonílica **1a** la forma tautomérica predominante en el estado sólido, de acuerdo con las correlaciones heteronucleares a corto y largo alcance obtenidas del experimento 2D ¹H-¹³C HETCOR. En el espectro IR (KBr) se observó una banda ancha de baja a mediana intensidad a 2200-3500 cm⁻¹, correspondiente a estiramientos O-H/N-H asociados. A partir del análisis de los espectros de RMN (DMSO-*d*₆) surge que la estructura carbonílica **1a** es la única que se observa en solución. Las propiedades fluorescentes del ácido 3-hidroxiquinurénico, λ_{máx} de absorción: 373 y 388 nm (ε_{DMF}: 6.49x10³ y 6.54x10³ M⁻¹cm⁻¹ respectivamente), λ_{máx} de emisión 474 nm (Figura 2) y rendimiento cuántico de fluorescencia, φ_F: 0.77±0.33, lo presentan como una sonda fluorescente muy promisorio. Esto se debe a su versatilidad sintética, ya que su núcleo heterocíclico permite modificaciones estructurales relativamente fáciles para la modificación de propiedades físicoquímicas y a su biocompatibilidad por tratarse de un derivado del metabolismo del triptofano.



XXXI Congreso Argentino de Química

25 al 28 de Octubre de 2016 Asociación Química Argentina

Sánchez de Bustamante 1749 – Ciudad de Buenos Aires – Argentina

The Journal of The Argentine Chemical Society Vol. 103 (1-2) January – December 2016 ISSN: 1852 -1207

Anales de la Asociación Química Argentina AAQAE 095 - 196

Figura 1

Figura 2