



Complejos de vanadio en el tratamiento de cáncer de seno. Un estudio teórico a primeros principios.

Lisset Noriega de los Santos^{1,2}, Francisco. J. Meléndez², Norma Caballero², Ramsés E. Gutiérrez³, Enrique Vergara⁴

¹Maestría en Ciencias Químicas, BUAP. Puebla, Pue. 72570. México

²LabQT, C. I. FCQ-BUAP. Dpto. de Físicoquímica. Puebla, Pue. 72570, México.

²Facultad de Ciencias Químicas, BUAP. Puebla, Pue. 72570. México.

³Centro de Químicas, ICUAP-BUAP. Puebla, Pue. 72570. México.

e-mail: only_liss@hotmail.com

El cáncer de seno es el principal cáncer detectado entre las mujeres¹. Existen nuevas opciones terapéuticas como la fototerapia², la cual necesita de un fotosensor adecuado para poder actuar de la mejor forma posible. En la búsqueda de nuevos fotosensores y anticancerígenos se han propuesto a los complejos de vanadio con estados de oxidación IV y V³. En este trabajo se estudian tres complejos de oxovanadio(V)⁴: [VO₂(L)][NH(Et)₃] (**V1**), [VO(L)(PrO)] (**V2**) and [VO(L)(BuO)] (**V3**), los cuales contienen una base de schiff como ligando: 1-(((5-chloro-2-oxidophenyl)imino)methyl)naphthalen-2-olate [L⁻²]. La optimización de las geometrías, el espectro IR y el análisis de población electrónica se calcularon con los funcionales B3LYP, B97D y M06-2X usando la base LanL2DZ para el átomo de vanadio a fin de describir los electrones de valencia y los electrones de core a través de un pseudo potencial, mientras que para los átomos de C, H, O, N y Cl se utilizó el conjunto de base 6-311++G (d,p). Los cálculos se realizaron en fase gas y en disolución (con agua, etanol y DMSO) ya que estos complejos son solubles en estos disolventes. Tanto en los parámetros geométricos como en el espectro IR, el funcional que mejores resultados arroja es B97D seguido de B3LYP y M06-2X al compararlos con los datos experimentales⁴. Las cargas obtenidas para el átomo de vanadio fueron positivas y con valores entre 0.8 a 1.5 para los tres complejos y los tres funcionales. El Mapa del Potencial Electroestático (MPE) muestra que los sitios nucleofílicos corresponden a los átomos de oxígeno que son ricos en electrones.

¹ Siegel, R.L.; Miller, K.D.; Jemal, A. Cancer Statistics, 2016. *Ca-Cancer J. Clin.* **2016**, *66*, 7-30.

² Josefsen, L.B.; Boyle, R.W. Photodynamic therapy and the development of metal-based photosensitisers. *Met-based Drugs.* **2008**, *2008*:276109.

³ Soriano-Ageda, L.A.; Ortega-Moo, C.; Garza, J.; Guevara-García, J. A.; Vargas, R. Formation of reactive oxygen species by vanadium complexes. *Comput. Theor. Chem.* **2016**, *1077*, 99-105.

⁴ Ebrahimipour, Y. S.; Sheikshoae, I.; Kautz, A.C.; Ameri, M.; Pasban-Aliabadi, H.; Rudbari, H.A.; Bruno, G.; Janiak, C. Mono- and dioxide-vanadium(V) complexes of a tridentate ONO Schiff base ligand: Synthesis, spectral characterization, X-ray crystal structure, and anticancer activity. *Polyhedron* **2015**, *93*, 99-105.