

PROYECTO Nº 11 (Alternativo)**Predicción de la afinidad por el ADN de dos complejos de Rutenio**

Los complejos metálicos de Ru (II) son moléculas constituidas por un átomo de Rutenio de carga 2+, unido por enlaces de coordinación (enlaces en los que uno de los dos átomos aporta ambos electrones para la formación del enlace), a tres ligandos. Algunos ejemplos son $[\text{Ru}(\text{bpy})_2\text{dppz}]^{2+}$ y $[\text{Ru}(\text{NH}_3)_4\text{dppz}]^{2+}$ siendo bpy y dppz heterociclos aromáticos, (ver Fig. 1). Muchos de éstos complejos, entre los que se encuentran los dos arriba mencionados, presentan dos propiedades de gran importancia para su uso como sondas de diagnóstico de enfermedades de origen genómico. En primer lugar se unen al ADN con alta afinidad, intercalándose entre los pares de bases del ADN. En segundo lugar, presentan el fenómeno conocido como "light switch", en el cual, la molécula es capaz de emitir ondas electromagnéticas cuando se encuentra intercalada en el ADN pero no cuando se encuentra libre en solución. En el caso de los complejos $[\text{Ru}(\text{bpy})_2\text{dppz}]^{2+}$ y $[\text{Ru}(\text{NH}_3)_4\text{dppz}]^{2+}$, la intercalación en el ADN se da usando el ligando dppz, siendo importante la interacción de stacking π - π .

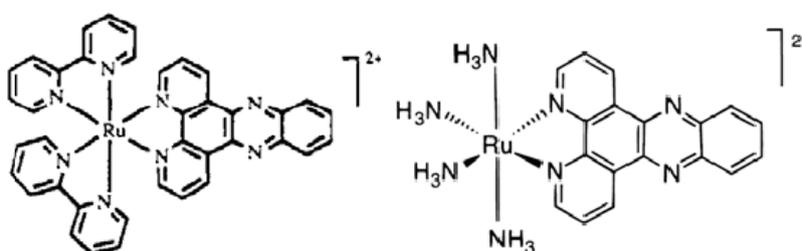


Fig. 1. Esquema de las estructuras de los complejos $[\text{Ru}(\text{bpy})_2\text{dppz}]^{2+}$ (izq.) y $[\text{Ru}(\text{NH}_3)_4\text{dppz}]^{2+}$ (der.)

Objetivo: En base a propiedades electrónicas predecir cuál de los dos complejos que se destacan en los párrafos anteriores, es capaz de intercalarse en el ADN con mayor afinidad.

Se proporciona a los estudiantes el siguiente artículo de referencia:

Liu, X.W.; Li, J.; Deng, H.; Zheng, K.C.; Mao, Z.W.; Ji, L.N. Experimental and DFT studies on the DNA-binding trend and spectral properties of complexes $[\text{Ru}(\text{bpy})_2\text{L}]^{2+}$ (L = dmdpq, dpq, and dcdpq). *Inorganica Chimica Acta*, **2005**, *358*, 3311-3319.

Instrucciones generales: Realice una búsqueda de información adicional sobre el tema que incluya la obtención de las estructuras cristalográficas o cualquier otro tipo de dato estructural disponible. Escoja uno o más métodos de los introducidos en el curso para realizar el estudio solicitado, fundamentando en base a qué elementos realiza su elección. Elabore un protocolo detallado (en el que se indique si es necesario construir las estructuras a estudiar o si las mismas se obtienen de archivos, si es necesario realizar optimizaciones de geometría o cálculos *single-point*, etc.) y como procesaría la información a obtener. Recuerde incluir en el informe escrito las referencias bibliográficas consultadas.

La fecha límite para la entrega del informe grupal es en la semana del 8 al 14 de noviembre.

Tutor asignado para el seguimiento del proyecto: Alicia Merlino