



PROPIEDADES TIPO HALÓGENO DEL CÚMULO DE Al_{13} IMITANDO AL ASTATO

22 junio, 2018

[Volumen 3 - Número 4](#)

La terapia alfa dirigida TAT (del inglés Targeted Alpha Therapy) busca erradicar, mediante decaimiento alfa, tumores cancerosos con el mínimo daño a células sanas. Su uso terapéutico ha sido posible gracias al acoplamiento de anticuerpos monoclonales con fármacos citotóxicos ADC (Antibody Drug Conjugates) etiquetados con nucleídos emisores de partículas alfa, siendo astato-211 (vida-media de 7.2 horas) uno de los más prometedores. A pesar de su gran potencialidad, debido a su escasez y corta vida-media, su uso ha sido limitado ya que su química y los mecanismos de desastatinación (eliminación de astato) in vivo no son bien entendidos, aumentando la posibilidad de toxicidad por la terapia radioactiva. Esto muestra que cualquier avance en el entendimiento en las propiedades del astato es de gran ayuda en la aplicación de TAT en el tratamiento del cáncer.

Dado que, en el campo de las nanopartículas, el modelo de superátomo busca imitar el comportamiento de átomos por cúmulos atómicos, es interesante preguntarse si es posible encontrar un superátomo capaz de imitar el comportamiento del astato. El cúmulo Al_{13} formado por 13 átomos de aluminio, juega un papel importante en este sentido debido a sus propiedades tipo halógeno.

En un trabajo recientemente reportado, demostramos mediante cálculos basados en la teoría de la funcional de la densidad DFT (Density Functional Theory) que el cúmulo Al_{13} sigue un patrón de reactividad más similar al astato que a cualquier otro halógeno. Los enlaces de átomos halógenos y alcalinos con Al_{13} y At muestran una gran similitud en sus procesos de transferencia de carga. Más aun, se muestra también que los compuestos que resultan de la astatinación de diarilo- g^3 -yodano (diaryliodinium salts en inglés), y que han sido considerados como posibles precursores para la síntesis de los trazadores etiquetados con ^{211}At , permanecen estables bajo el intercambio de At por Al_{13} . Estos resultados proporcionan una prometedora prueba de concepto PoC (del inglés "proof of concept") de que el cúmulo Al_{13} imita el comportamiento del átomo de At en los compuestos de astato y puede coadyuvar a un mejor entendimiento de su química y así optimizar los procesos de radiomarcado de biomoléculas. Estos trabajos son el resultado de una colaboración con los Drs. Bertha Molina y Jorge R. Soto de

la Facultad de Ciencias de la UNAM.

Referencias

B. Molina, J.R. Soto, J.J. Castro, *Stability and Nonadiabatic Effects of the Endohedral Clusters $X@Al_{12}$ ($X = B, C, N, Al, Si, P$) with 39, 40, and 41 Valence Electrons*, J. Phys. Chem. C 116 (2012) 9290-9299.

B. Molina, J.R. Soto, J.J. Castro, *Halogen-like properties of the Al_{13} cluster mimicking astatine*, PCCP 20 (2018) 11549-11553.

Jorge J. Castro, Departamento de Física del Cinvestav (Zacatenco)