

ESTUDO TEÓRICO DE DIFERENTES ESTEQUIOMETRIAS DO COMPLEXO NANOESTRUTURADO DO ION LOSARTANATO COM ZINCO (II)

Laís NUNES (CEFET-MG); Kherolayne RIBEIRO (CEFET-MG); Marcel BRITO (CEFET-MG); Angelo DENADAI (CEFET-MG)

Objetivo: Investigar a estabilidade de diferentes estequiometrias ($p = 1-4$ e $q = 1-4$), apoiando-se na determinação experimental da mesma por meio de titulações condutimétricas, bem como na comparação dos espectros IV e RMN do KLos e do $[Znp(Los)q]$. Metodologia: Foram construídas as estruturas do $[Znp(Los)q]$, para diferentes combinações de p e q , posicionando-se o(s) átomo(s) de zinco de modo a favorecer a interação com o anel tetrazólico e as hidroxilas;

Uma análise conformacional do Los- foi empreendida no programa Vega ZZ, e a estrutura gerada foi otimizada no programa MOPAC 2007. As energias de complexação (EC) foram estimadas por meio do algoritmo $EC = EP - p.EZn - q.ELs - 6.Eaq$. Resultados: estequiometrias $[Zn(Los)4]$ e $[Zn2(Los)4]$ são as de maior estabilidade, o que está de acordo com os resultados experimentais de titulação condutimétrica, que favorece a relação 1:2 (Zn:Los);

A capacidade de solvatação do complexo foi estimada com base em uma comparação entre a superfície polar (PSA) de cada complexo e a água, ocorrendo melhor resultado para a combinação 1:4;

Uma análise adicional de reconhecimento de padrões PCA e HCA, fundamentada em parâmetros constitucionais e topológicos, demonstrou que as estequiometrias 1:4 e 2:4 pertencem a categorias bastante diferentes, o que não favorece a hipótese de coexistência e/ou competitividade entre as mesmas. Conclusão: A investigação das características físico-químicas e estruturais de complexos metal-fármaco, que podem ser gradualmente rompidas nas condições digestivas, traz importantes contribuições para o entendimento desses sistemas e a proposição de formulações farmacêuticas para a liberação controlada destas substâncias.

Palavras-chave: Estudo teórico. Antihipertensivo. Losartan.