

ESTUDIO TEORICO PRELIMINAR DE ESPECTROS UV DE SULFADIACINA EN MEZCLAS BINARIAS AGUA:METANOL



Castillo Marcelo O.¹, Pinto Vitorino Graciela²

¹Depto. de Medicina, Depto. de Química, Depto. de Bioquímica, ²Química Medicinal, Depto. de Farmacia, GQM-CRIDECIT, FCNyCS, UNPSJB, Ciudad Universitaria Km 4, Comodoro Rivadavia, 9005, Chubut, Argentina.

*moc_comodoro@yahoo.com.ar

INTRODUCCION

La disolución de un sólido en un solvente comprende dos procesos, disgregación y solvatación. Esta última depende de las características del soluto y del solvente, de la temperatura, la presión, el pH y de los efectos químicos, eléctricos y estructurales que producen las interacciones entre soluto y solvente. El agregado de un cosolvente puede favorecer la solubilidad y, a nivel molecular, la esfera de solvatación de las moléculas adquiere características que varían con la proporción del cosolvente agregado. Esta particularidad se manifiesta, por ejemplo, en el espectro ultravioleta de la solución. La sulfadiazina (SDZ) es un fármaco antibacteriano con limitaciones en su solubilidad: En este trabajo estudiamos teóricamente las modificaciones del espectro UV-Vis de SDZ en diferentes mezclas binarias de agua:metanol.

Para ello, calculamos la constante dieléctrica de cada muestra binaria de agua:metanol aplicando la ecuación de Moore:

$$\epsilon = \sum_{i=1}^n \epsilon_i X_i$$

Esta ecuación es más sencilla que la de Clausius-Mossotti, y solo tiene en cuenta la fracción molar o los porcentajes v/v o m/v de las distintas mezclas. Una vez obtenida la constante dieléctrica, se introduce como parámetro en los cálculos DFT y se obtienen los espectros simulados.

Palabras clave: Sulfadiazina, Moore, solvatocromismo, DFT, computacional.

OBJETIVO

- ✓ Estudiar teóricamente las modificaciones del espectro UV de SDZ en diferentes mezclas binarias de agua:metanol.

MATERIALES Y METODOS

Se realizaron cálculos de energía de SDZ utilizando la teoría IECPCM con un nivel de cálculo TD-B3LYP 6-31+G(d)1 en un solvente implícito simulado constituido por la mezcla binaria de agua:metanol en proporciones 10:0; 9:1; 8:2; 7:3; 6:4; 5:5; 4:6; 3:7; 2:8; 1:9 y 0:10. Para ello se calculó, en cada caso, el valor de la constante dieléctrica utilizando la ecuación de Moore¹. Posteriormente se trabajó con un método híbrido incorporando a cada sistema una molécula de metanol explícita. Se compararon los resultados con datos experimentales obtenidos previamente en el grupo de trabajo. La curva de regresión se estima utilizando el paquete de datos de Excel®.

RESULTADOS Y DISCUSION

Los valores de máxima absorbancia al UV-Vis ($\lambda_{\text{máx}}$) obtenidos por el método de solvente implícito superan a los valores experimentales en un promedio de 2,6%. Sin embargo, en el método híbrido si bien se observa una sobreestimación de los valores de $\lambda_{\text{máx}}$ experimental, con un error promedio de 6,7% respecto a los datos experimentales, la tendencia de la distribución de los valores es muy similar.

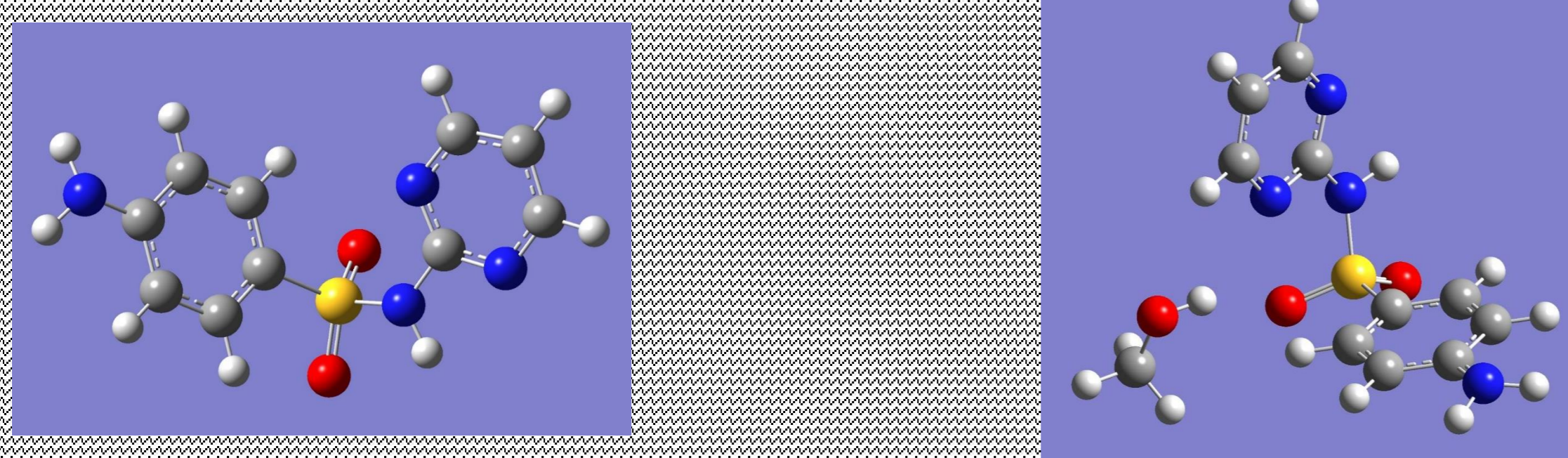


Figura 1. SDZ (izquierda) y SDZ-MetOH (derecha).

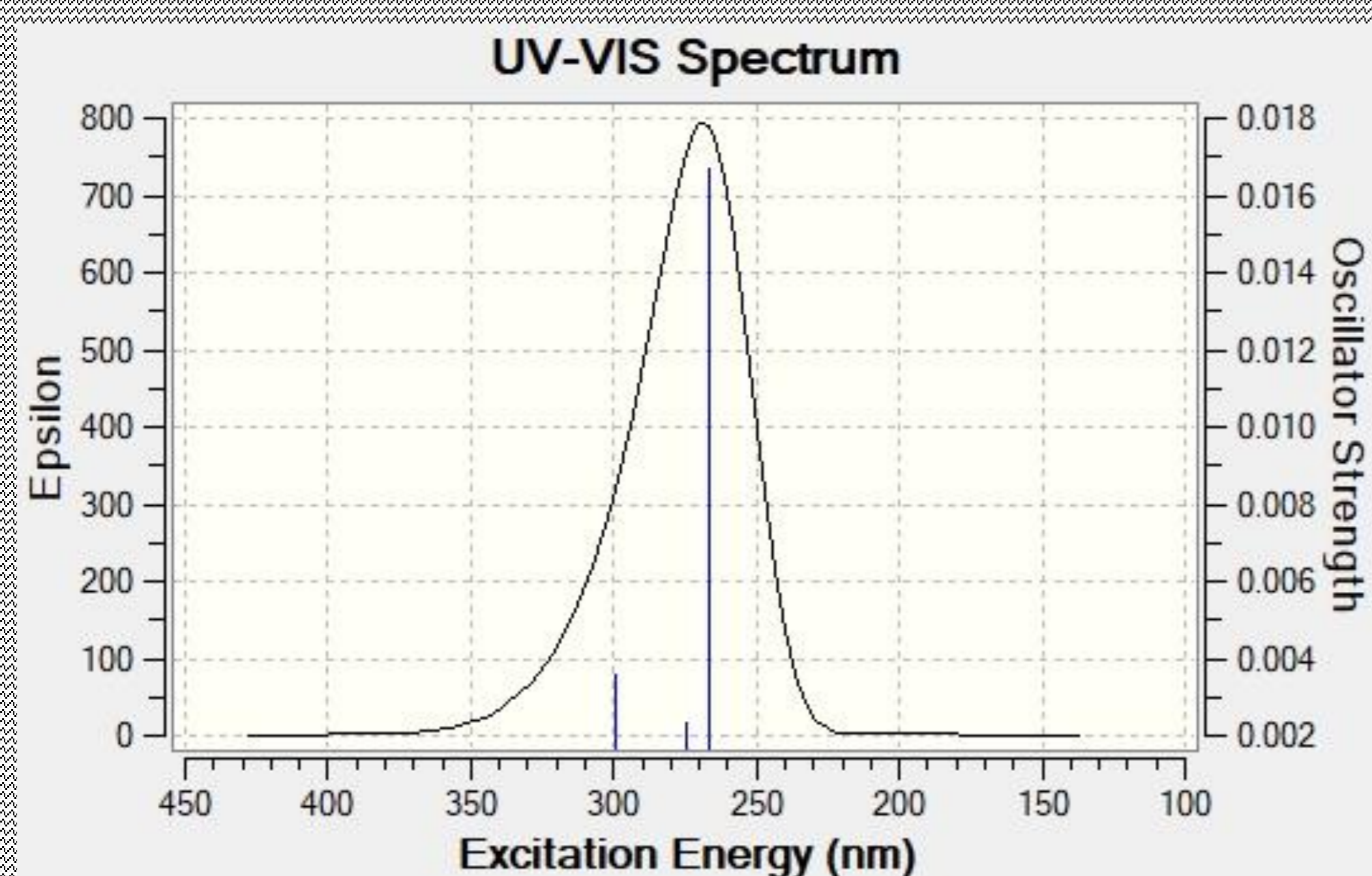


Figura 2. Espectro UV simulado de SDZ por el método implícito para la proporción 30% de metanol : agua y nivel de cálculo B3LYP 6-31+G(d)

Tabla 1. $\lambda_{\text{máx}}$ teóricos calculados para SDZ (implícito e híbrido) y comparación con $\lambda_{\text{máx}}$ experimentales, obtenidos en mezclas binarias agua:metanol.

% v/v MetOH	SDZ					
	ϵ Solv	$\lambda_{\text{máx-impl}}$	$\lambda_{\text{máx-exp}}$	error%	$\lambda_{\text{máx-hibrido}}$	error%
0	79,0000	266,52	256,00	-4,11	277,69	-8,47
10	74,3613	266,52	256,90	-3,74	275,56	-7,26
20	69,7226	266,51	256,90	-3,74	277,66	-8,08
30	65,0839	266,50	256,90	-3,74	277,64	-8,07
40	60,4452	266,49	258,00	-3,29	277,62	-7,60
50	55,8065	266,47	258,00	-3,28	277,57	-7,59
60	51,1678	266,46	260,10	-2,45	275,59	-5,96
70	46,5291	266,44	261,00	-2,08	277,54	-6,34
80	41,8904	266,41	262,00	-1,68	277,5	-5,92
90	37,2517	266,39	262,00	-1,68	277,45	-5,90
100	32,6130	266,35	270,00	1,35	277,39	-2,74

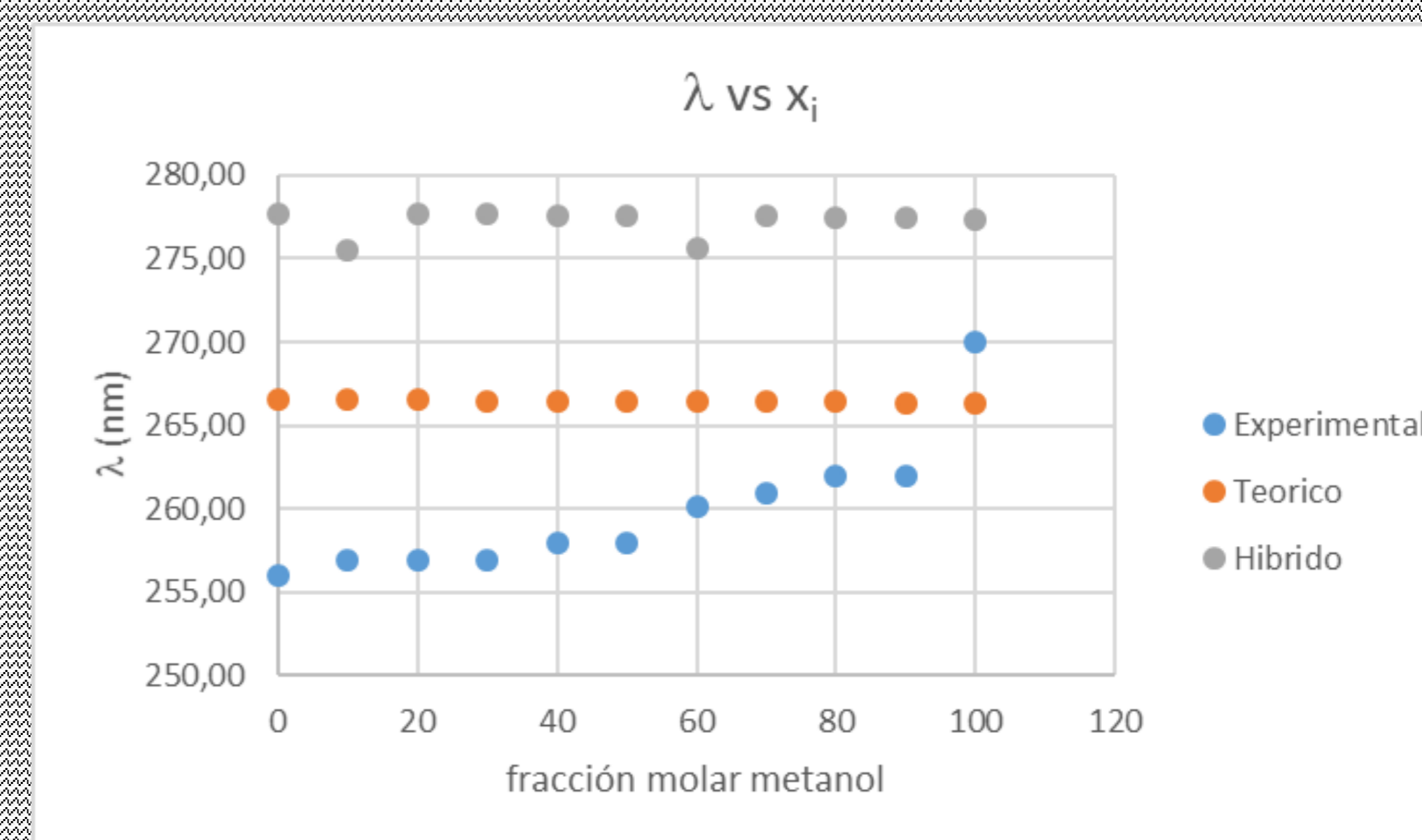


Figura 3. Comparación entre $\lambda_{\text{máx}}$ teóricos (implícito e híbrido) y $\lambda_{\text{máx}}$ experimentales obtenidos en mezclas binarias agua:metanol.

CONCLUSIONES

Es posible simular los espectros UV-Vis de SDZ en mezclas simuladas de diversas proporciones de agua:metanol empleando el método de solvente implícito y un método híbrido con una molécula de metanol, y en ambos casos las diferencias de los valores obtenidos para los $\lambda_{\text{máx}}$ son muy aceptables. Sin embargo, para lograr una mejor reproducibilidad de los datos experimentales continuamos trabajando con el método híbrido aumentando la cantidad de moléculas de solvente explícitas.

REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

¹Neira M, Jiménez F, Ponce de León L. *Rev. Colomb. Cienc. Quím. Farm.* 1980, 37-61.

FINANCIAMIENTO

Secretaría de Ciencia y Técnica-Universidad Nacional de la Patagonia San Juan Bosco.