

ESTUDIO ESTRUCTURAL DEL PESTICIDA LINDANO (γ -HEXACLOROCICLOHEXANO)

Castillo Ma. Victoria, Iramain Maximiliano, Manzur María E, Guzzetti Karina, Brandán Silvia A.
Cátedra de Química General, Instituto de Química Inorgánica, Facultad de Bioquímica, Química y Farmacia, Universidad Nacional de Tucumán, Ayacucho 471, 4000, Tucumán, Argentina. e-mail: vitimol@hotmail.com

INTRODUCCIÓN

El γ -hexaclorociclohexano (γ -HCH), conocido como Lindano, es un plaguicida organoclorado que junto con sus otros isómeros se consideran contaminantes ambientales y causantes de diferentes patologías debido a sus elevadas toxicidad [1].

METODOLOGÍA

GaussView 5.0	Gaussian 09 [3]	NBO [4]	AIM2000 [5]
Modelado de los distintos isómeros	Optimización	Cálculos DFT	Propiedades electrónicas
	Método B3LYP/6/311++G**		Propiedades topológicas

OBJETIVOS

Predicir y comparar las propiedades estructurales, electrónicas y topológicas de los isómeros alfa, beta, gama y delta del hexaclorociclohexano en fase gaseosa y en solución etanólica, y comparar los resultados con los reportados para Hexaclorobenceno (HCB) [2].

RESULTADOS

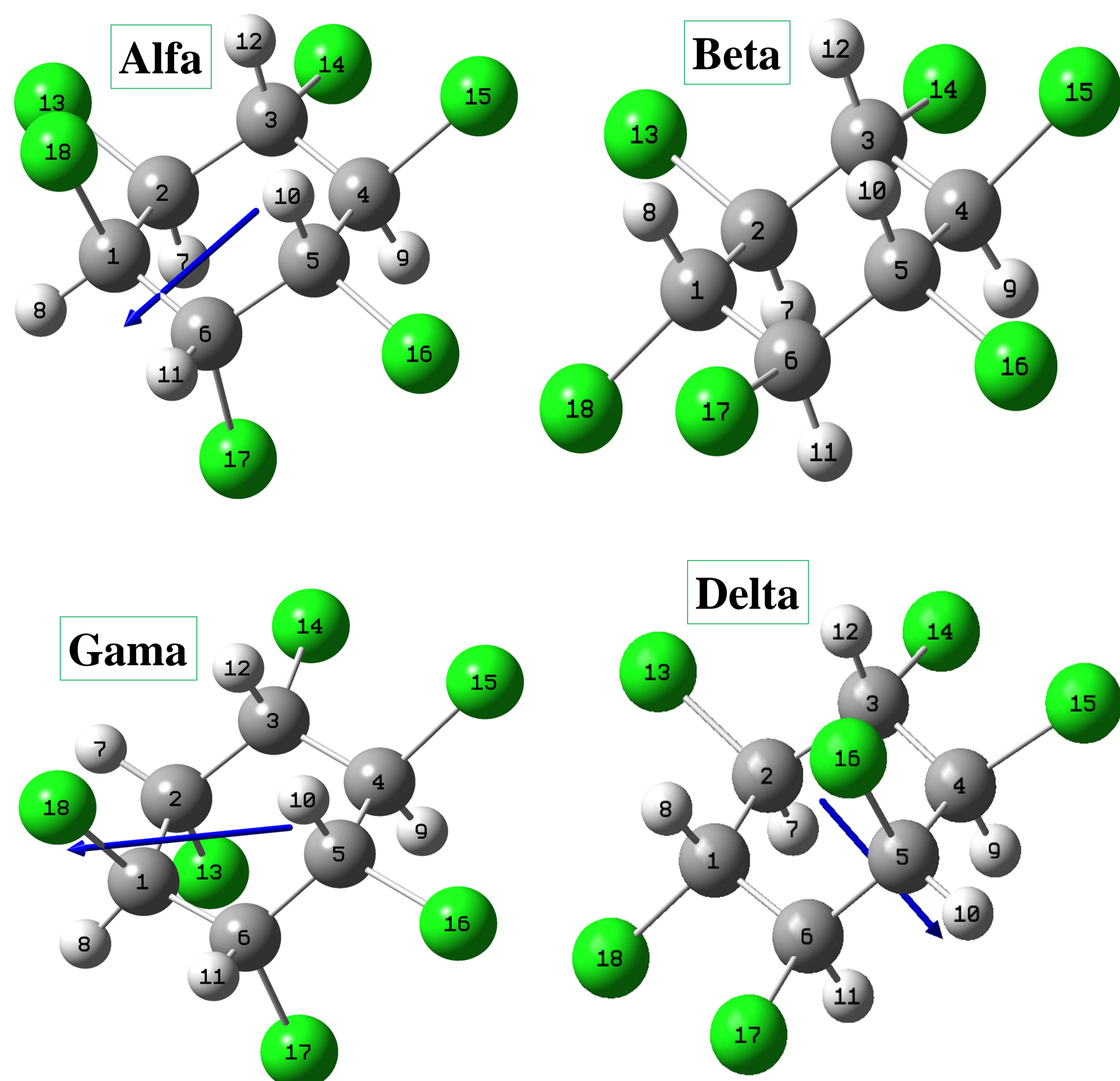


Fig. 1: Estructuras teóricas y orientaciones de los vectores momentos dipolares de los isómeros de HCH.

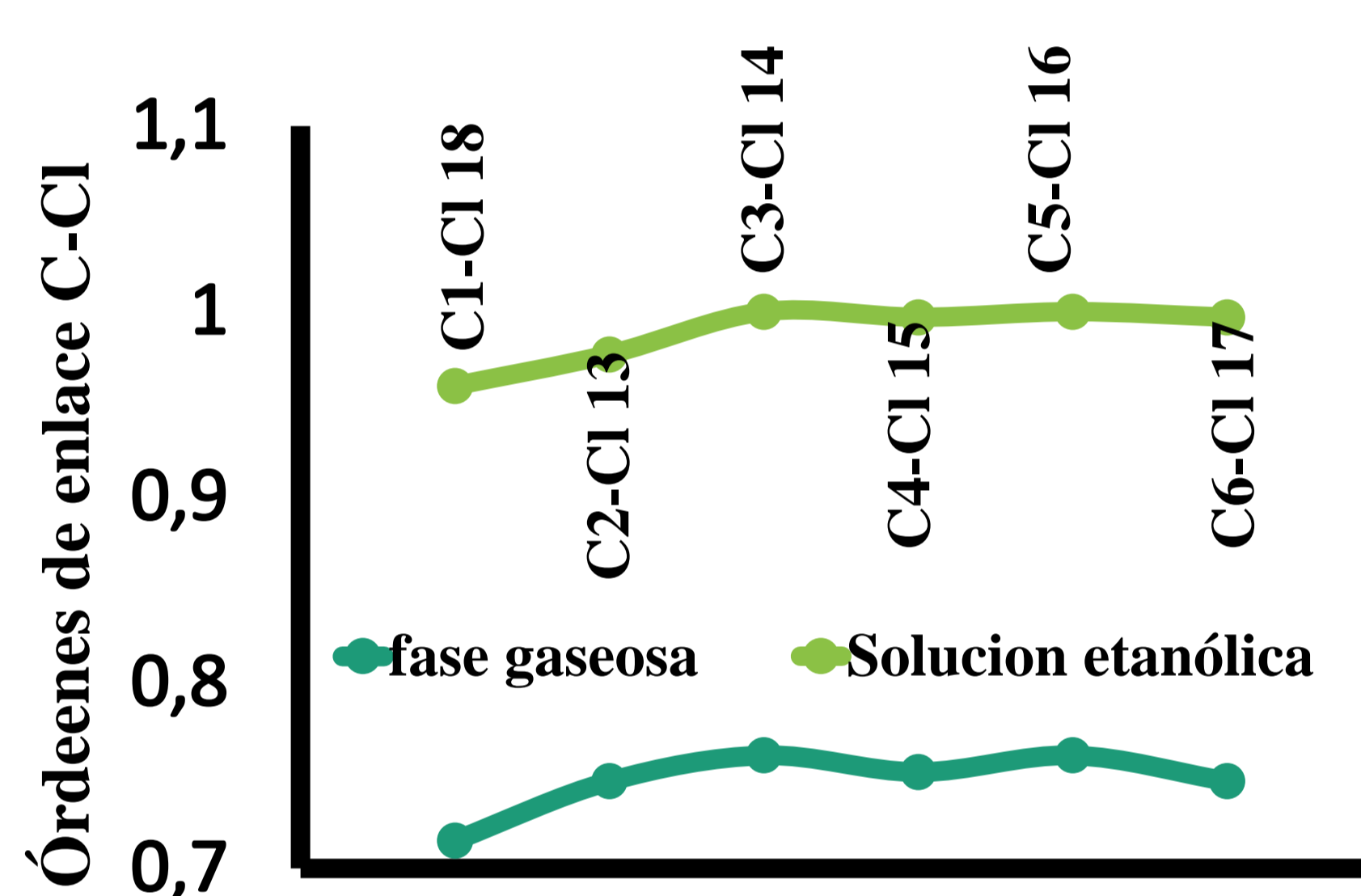


Fig. 2: Ordenes de enlace C-Cl para el isómero gama.

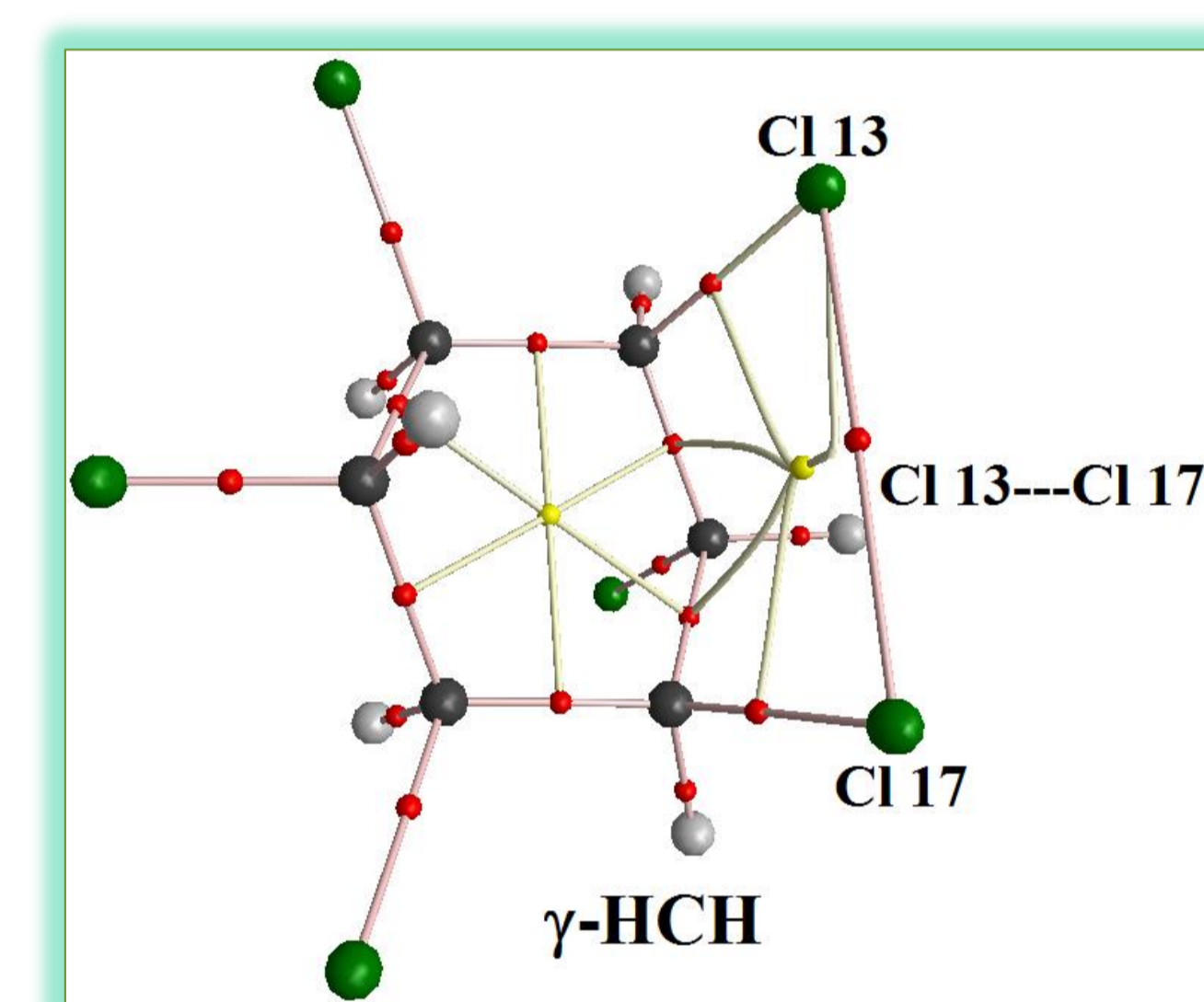


Fig. 6: Estructura molecular del isómero gama.

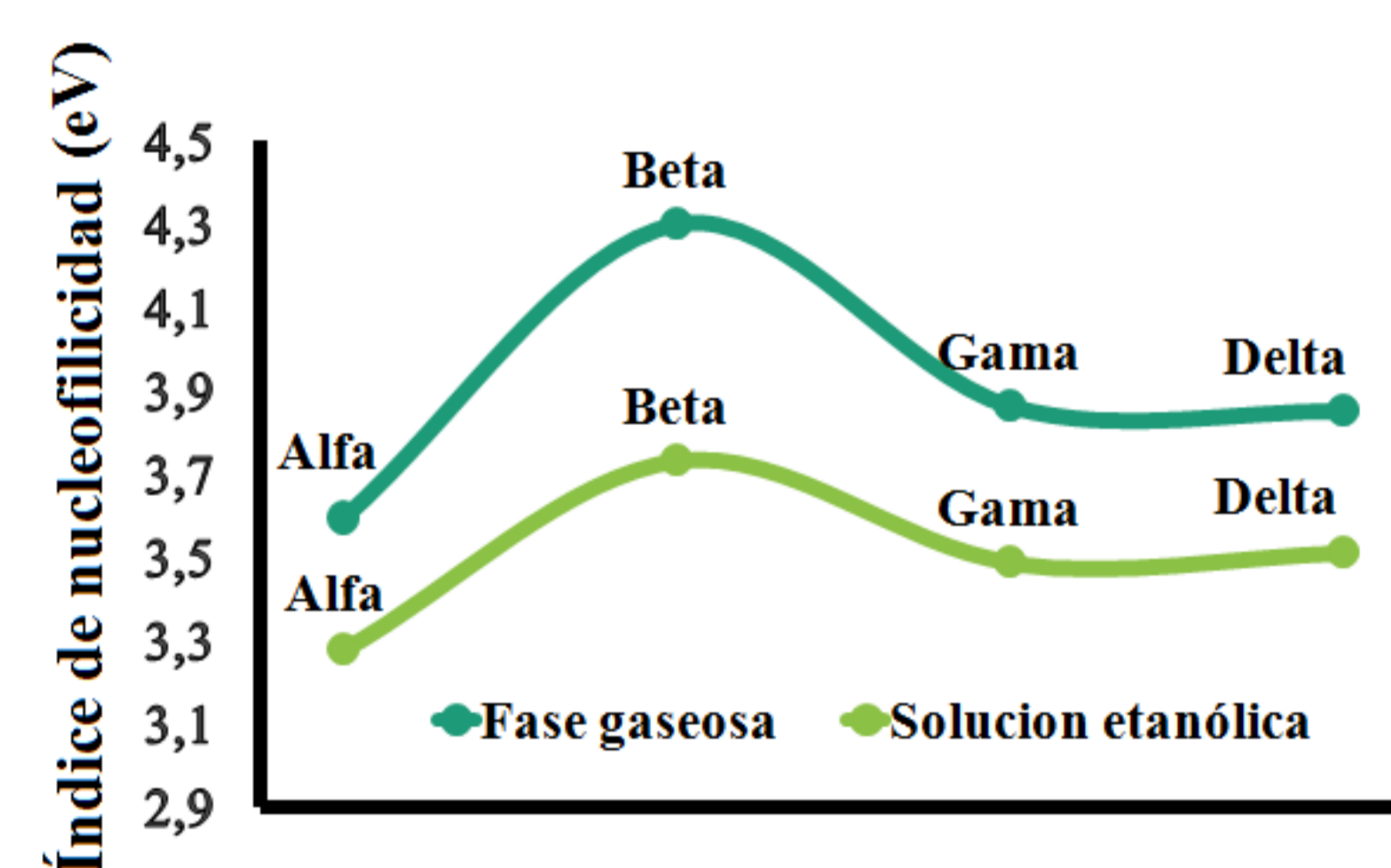


Fig. 5: Índices de nucleofilicidad calculados

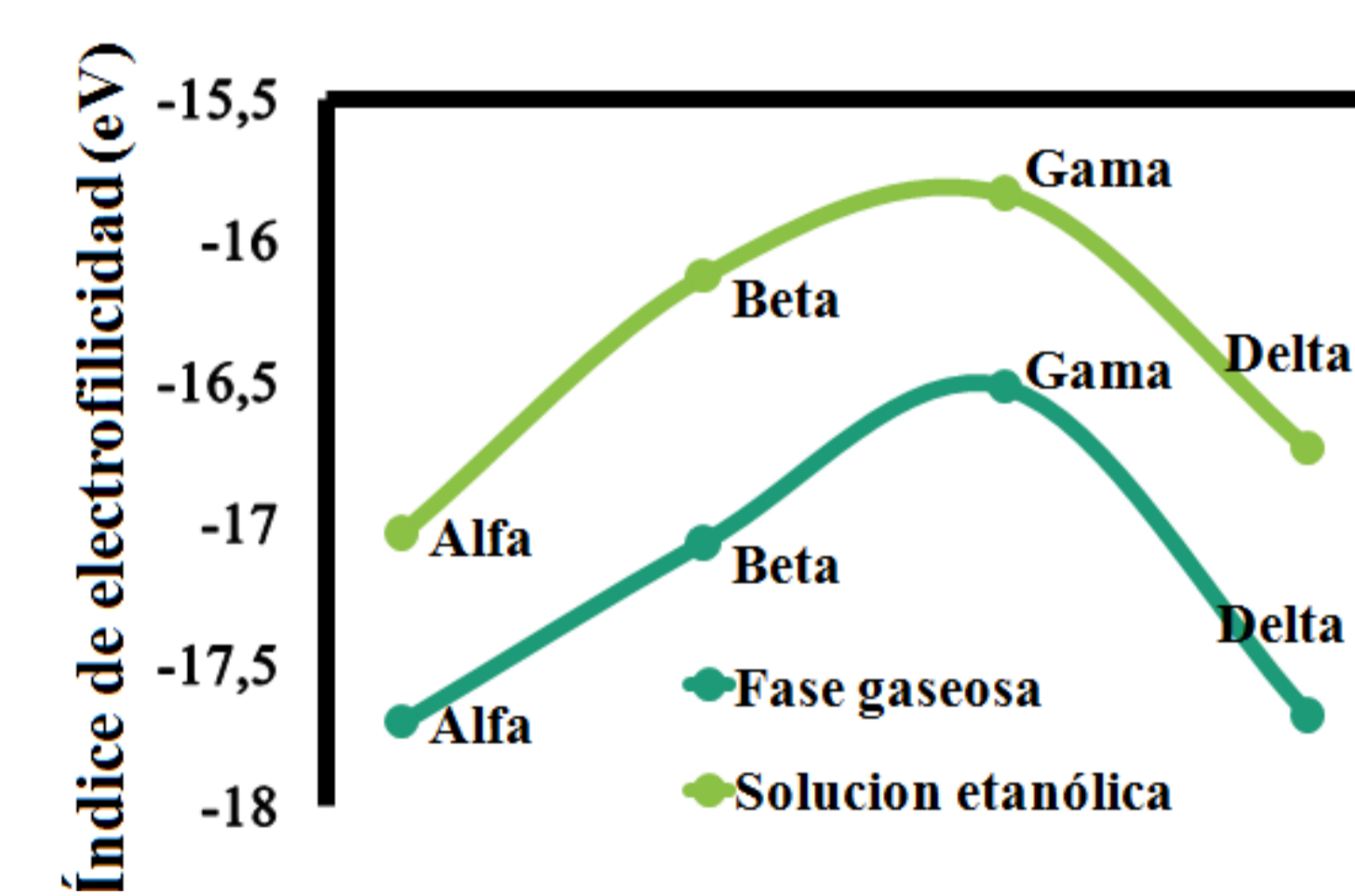


Fig. 5: Índices de electrofilicidad calculados

Tabla 1: valores de GAP calculados.

	B3LYP/6-311++G**				
(eV)	α -HCH	β -HCH	γ -HCH	δ -HCH	HCB [2]
HOMO	-8,5505	-8,5125	-8,3162	-8,597	-7,4723
LUMO	-1,5101	-2,0412	-1,7527	-1,7811	-1,9864
GAP	7,0404	6,4714	6,5635	6,816	5,4859

Tabla 2: Energías y valores de momento dipolar calculados.

Estructuras	E (Hartrees)	μ (Debye)
α -HCH (C_2)	-2993,6685	2,14
β -HCH (C_2H)	-2993,6641	0,00
γ -HCH (C_s)	-2993,6630	2,73
δ -HCH (C_s)	-2993,6652	1,98
HCB (D_{6h}) [2]	-2990,0076	0,36

CONCLUSIONES

Los isómeros de HCH serían más reactivos en fase gaseosa que en solución etanólica. La no planaridad de estos isómeros, disminuirían ligeramente su reactividad con respecto al HCB que, junto a su baja solubilidad en agua, justificarían su persistencia ambiental en el tiempo y su efecto nocivo en la salud humana.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] National Toxicology Program, Department of Health and Human Services. Second Annual Report on Carcinogens (1981)
- [2]. Brandán SA. Descriptors, structural and spectroscopic properties of heterocyclic derivatives of importance for health and the environment. NOVA publishers-2015
- [3] A.B. Nielsen, A.J. Holder, Gauss View 3.0, User's Reference, GAUSSIAN Inc., Pittsburgh, PA, 2000-2003.
- [4] E.D. Glendening, et al, NBO 3.1; Theoretical Chemistry Institute, University of Wisconsin; Madison, WI, 1996.
- [5] F. Biegler-König, J. Schönbohm, D. Bayles, AIM2000;, J. Comput. Chem. 22 (2001) 545.

AGRADECIMIENTOS: Secretaría de Arte, Ciencia e Innovación Tecnológica (SCAIT) UNT. Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET)