

# ESTUDIO ESTRUCTURAL Y VIBRACIONAL DEL OPIOIDE SINTETICO: METADONA

Castillo Ma. Victoria, Romano Elida, 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](mailto:vitimol@hotmail.com)

## INTRODUCCION

El compuesto 6-dimetilamino-4,4-difenil-3-heptanona, más conocido como metadona, es un opioide sintético ampliamente usado tanto en terapias de mantenimiento para personas con dependencia de opioides, así como analgésico.[1]. Estructuralmente, metadona presenta un carbono quiral, por lo que se espera que presente dos formas enantiómeras (+) y (-).

Se realizaron cálculos teóricos, de los enantiómeros ( $\pm$ ) Metadona en sus tres formas base libre, catiónica y clorhidrato. (Fig. 1)

## METODOLOGIA

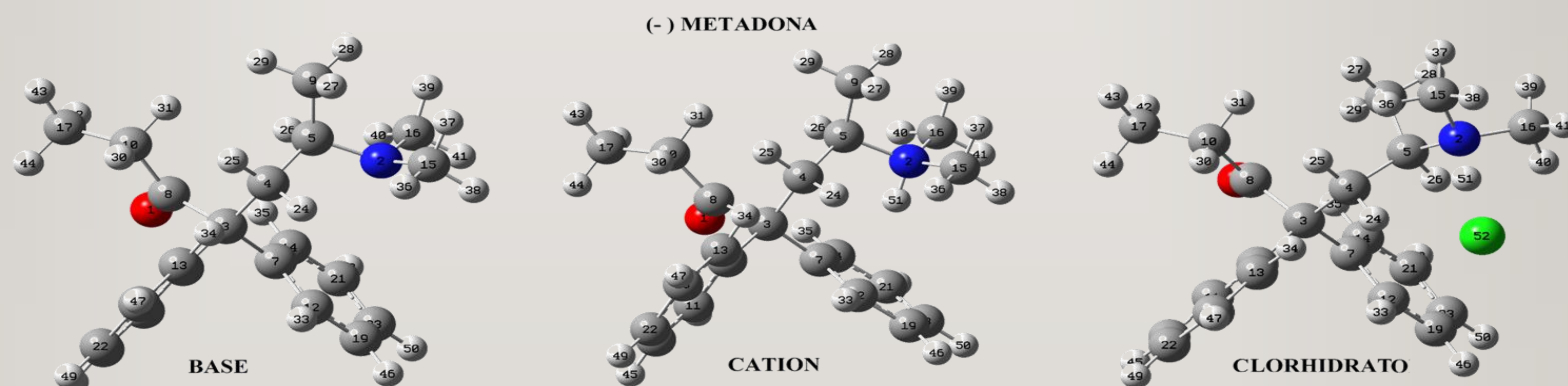
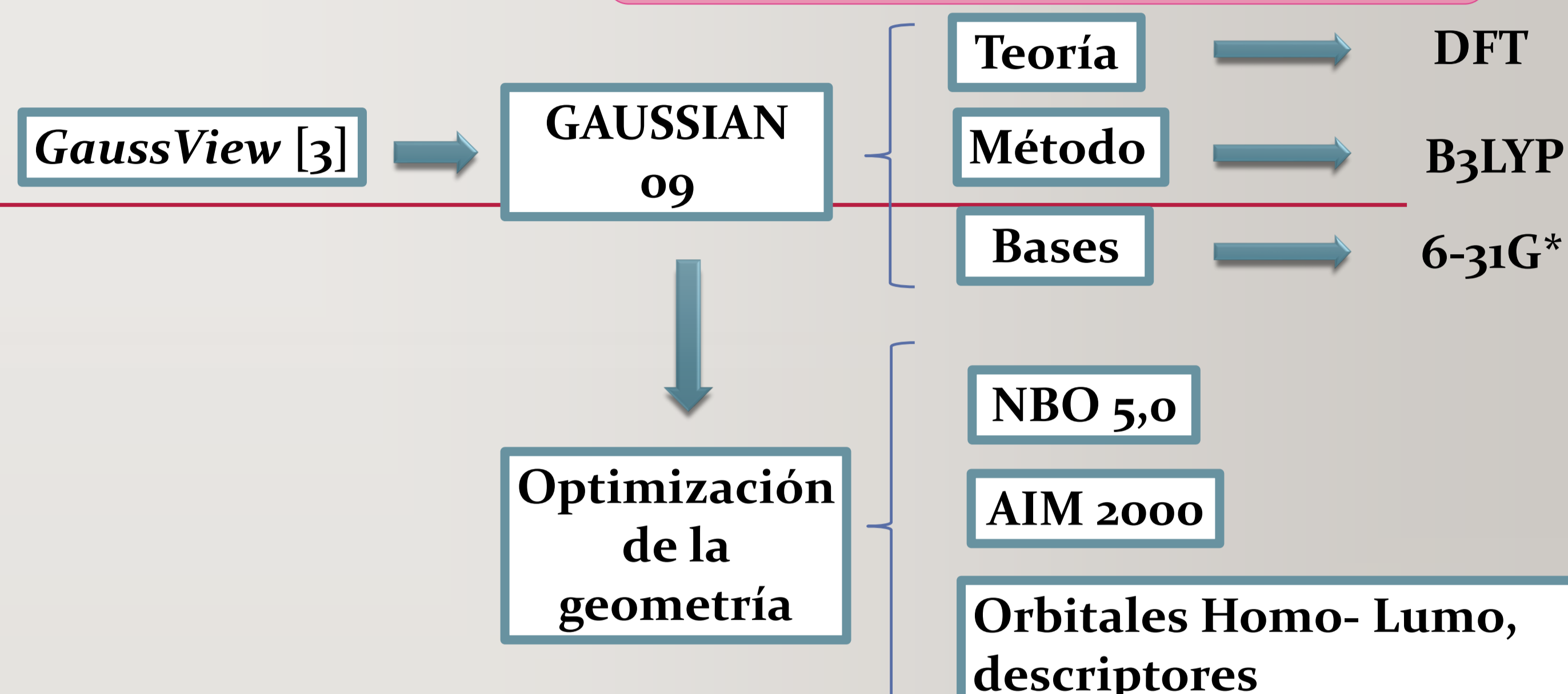


Fig. 1: Estructuras teóricas de (-) Metadona

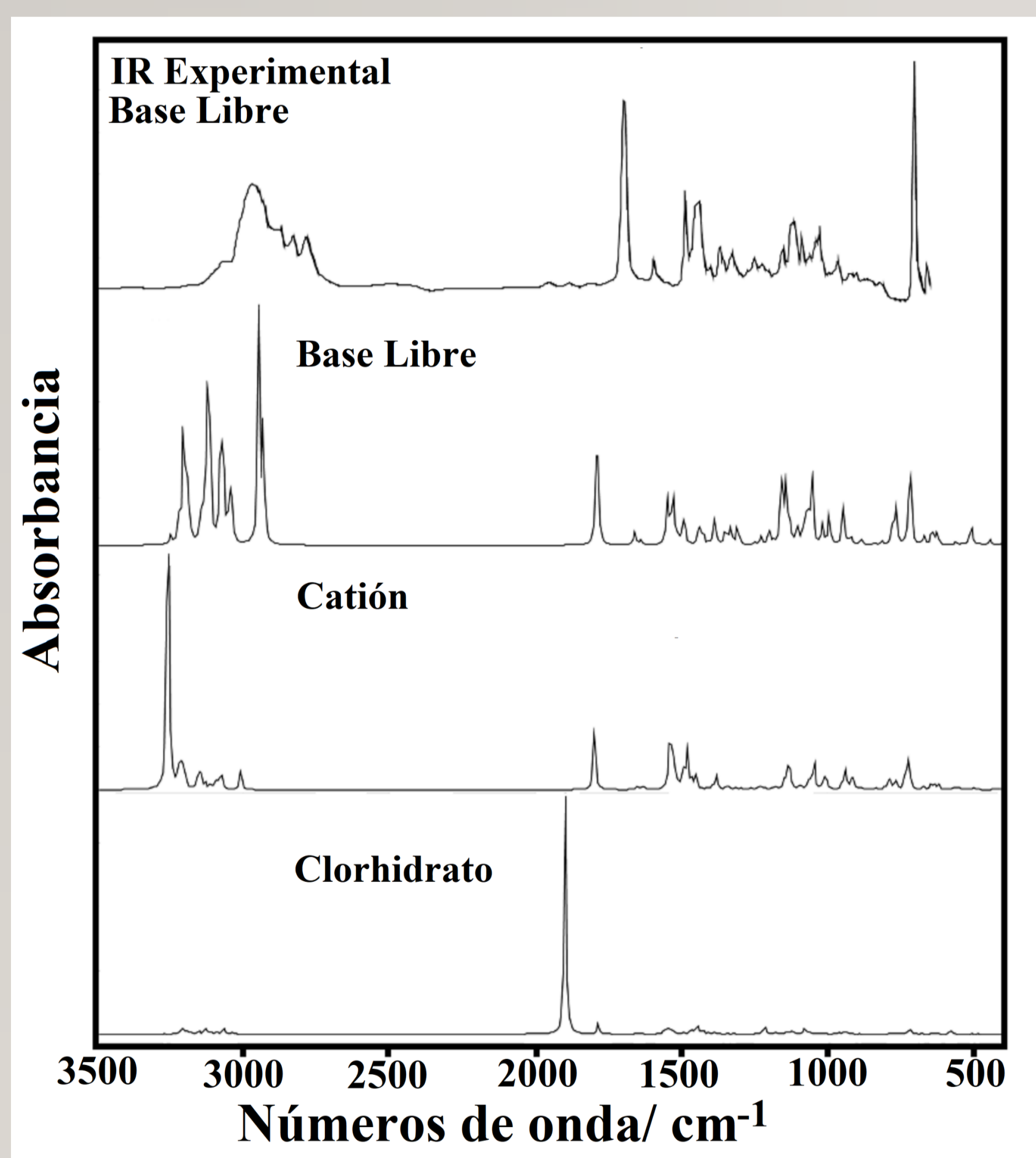


Fig. 2: Comparación de los espectros de IR

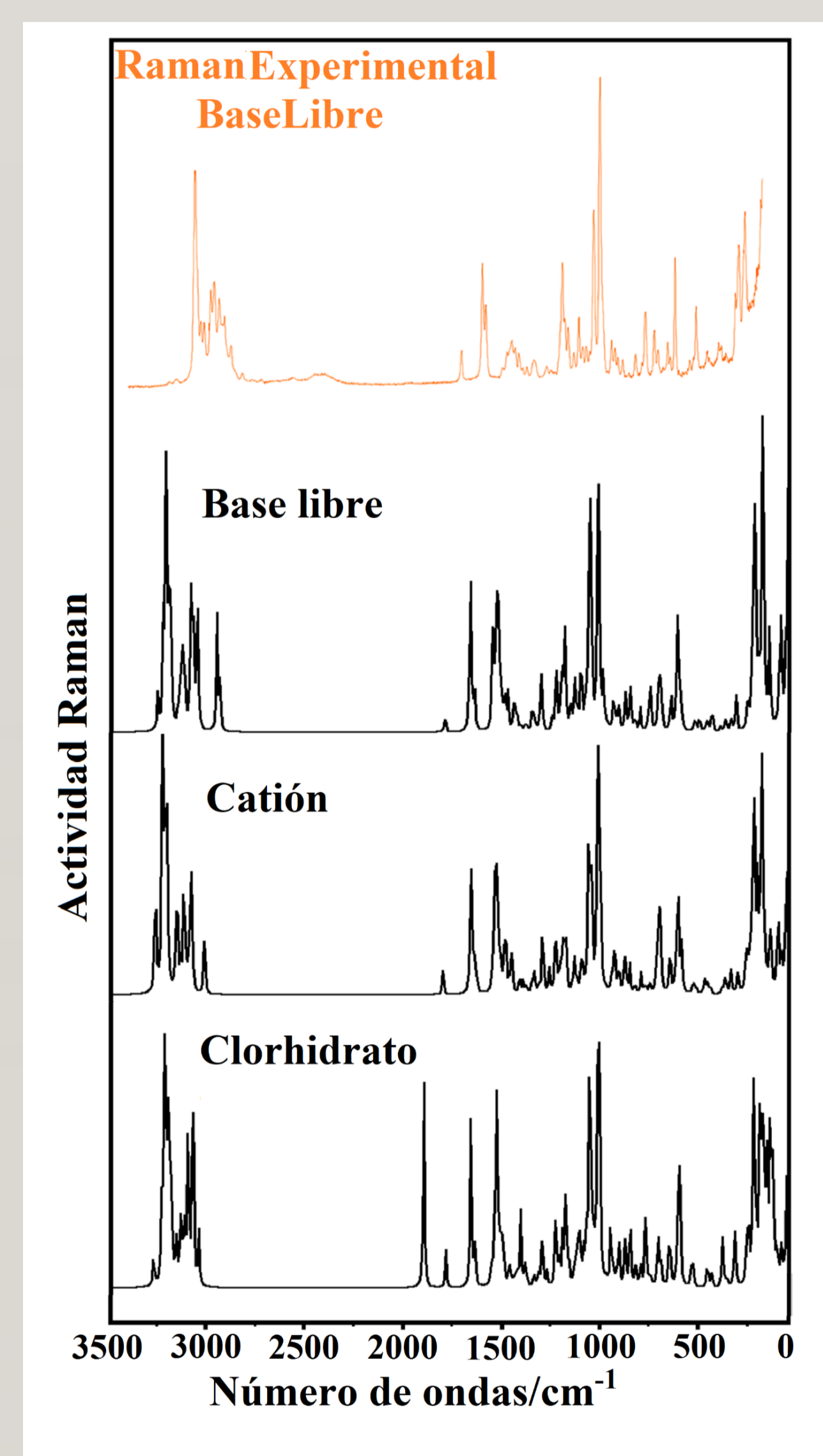


Fig. 2: Comparación de los espectros Raman

## RESULTADOS

Tabla 1: Energía HOMO y LUMO, potencial químico, ( $\mu$ ), electronegatividad, ( $\chi$ ) dureza global, ( $\eta$ ), blandura global (S), índice de electrofilicidad ( $\omega$ ), nucleofilicidad (E).

(-) Metadona B3LYP/6-31G*						
Orbital	BASE LIBRE		CATIONICA		CLORHIDRATO	
	Gas	PCM	Gas	PCM	Gas	PCM
HOMO	-5,3688	-5,5348	-9,1404	-9,0832	-5,7716	-5,0423
LUMO	-0,7374	-0,7619	-3,7525	-3,7198	-0,9470	-1,0857
GAP	4,6314	4,7729	5,3879	5,3634	4,8246	3,9566
DESCRIPTORES						
$\chi$	-2,3157	-2,3865	-2,6939	-2,6817	-2,4123	-1,9783
$\mu$	-3,0531	-3,1484	-6,4464	-6,4015	-3,3593	-3,0640
$\eta$	2,3157	2,3865	2,9939	2,6817	2,4123	1,9783
S	0,2159	0,2095	0,1856	0,1864	0,2073	0,2527
$\omega$	2,0127	2,0768	7,7129	7,6406	2,3390	2,3728
E	-7,0702	-7,5135	-17,3663	-17,1670	-8,1036	-6,0615

## CONCLUSIONES

Tanto los estudios NBO como los descriptores globales predicen la estabilidad de las especies catiónicas en ambos medios. La especie clorhidrato sería la más reactiva en solución.

## BIBLIOGRAFIA

- [1] A. Iruin y col, Rev. Esp. Salud Pública 2001; (75) 207-220
- [2] G. Rauhut, P. Pulay, J. Phys. Chem. 99 (1995) 3093-3099.
- [3] T. Sundius, Vib. Spectrosc. (29) 89-95.
- [4] R.A. Rudyk y col, International J.Sc. Res. Methodology 10(4) (2018) 70-97.