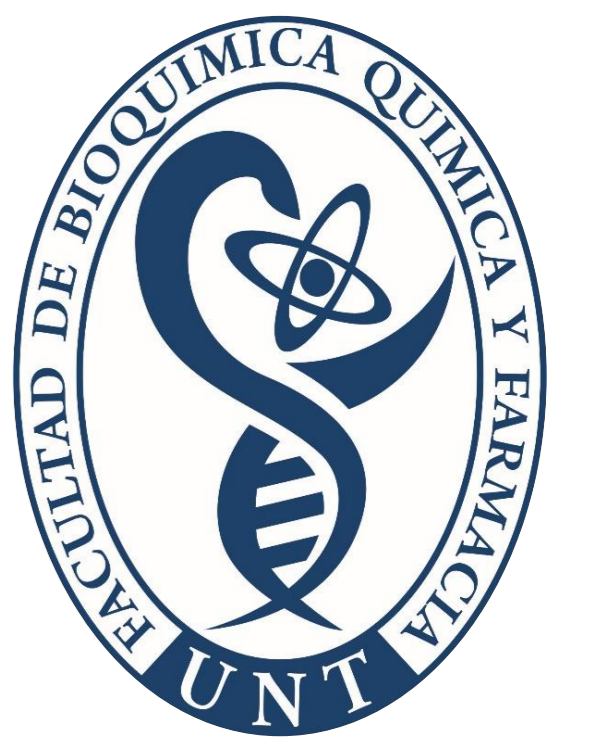




PROPIEDADES ESTRUCTURALES Y ELECTRONICAS DEL ANTIVIRAL RIMANTADINA



José Ruiz Hidalgo^a, Maximiliano A. Iramain^a, Silvia A. Brandán^b

^aCátedra de Química General, Instituto de Química Inorgánica, Facultad de Bioquímica, Química y Farmacia, UNT, Ayacucho 471, 4000, S.M. de Tucumán, Tucumán, Argentina. E-mail: joseh16@yahoo.com.ar

INTRODUCCIÓN

La Rimantadina (α -metil-1-adamantanometilamina) (Fig.1) es un agente antiviral que ha sido considerado como el fármaco de elección para el tratamiento de la influenza A [1,2,3].

MATERIALES Y MÉTODOS

se evaluaron las propiedades estructurales electrónicas y topológicas de base libre, catión y clorhidrato (Fig.2), en fase gas y en solución acuosa. Se realizaron cálculos de Orbitales Naturales de Enlace (NBO) y Átomos en Moléculas (AIM) aplicando métodos de la Teoría de los Funcionales de la Densidad (DFT) a nivel B3LYP/6-31G*. También se predijeron sus reactividades y comportamientos en fase gas mediante los cálculos de los orbitales moleculares de fronteras al mismo nivel de teoría.

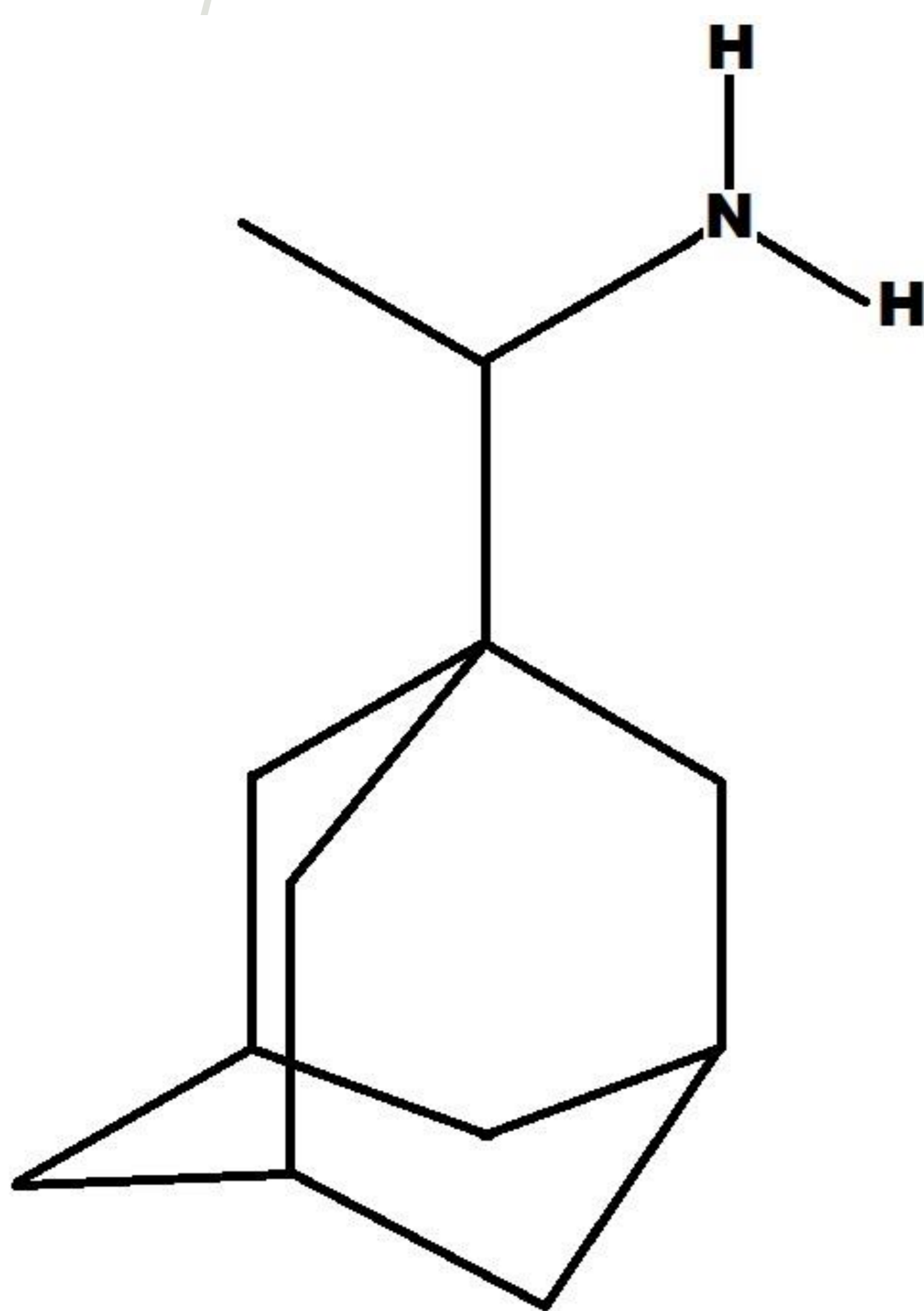


Figura 1: Estructura química de Rimantadina

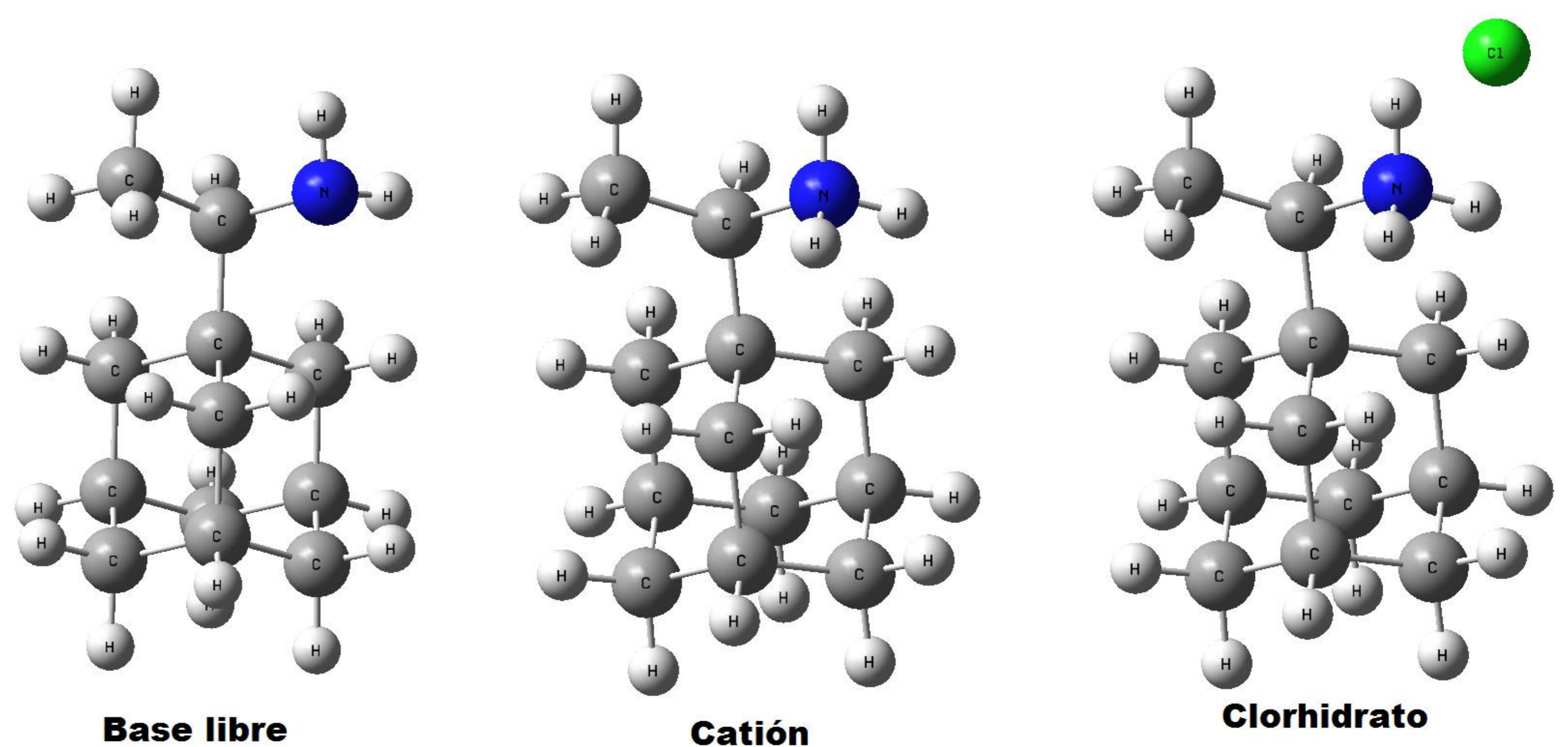


Figura 2: Estructuras moleculares base libre, catión y clorhidrato

RESULTADOS

La Rimantadina presenta momento dipolar de 1,07 D y volumen en fase gas de 215.0 Å³. Los valores de los momentos dipolares resultaron mayores para la forma catiónica. Las contribuciones en las energías de deslocalización son mayores para la especie clorhidrato que para su base libre mientras que con el análisis de AIM se determinaron las posibles interacciones intramoleculares presentes, justificando de esta forma la mayor estabilidad del clorhidrato.

CONCLUSIONES

La presencia de mayor número de interacciones iónicas y de enlaces halógenos en el clorhidrato, justifican su mayor estabilidad; y teniendo en cuenta los valores de energía GAP, esta especie es la más reactiva.

REFERENCIAS

1. Wintermeyer y col., *Annals of Pharmacotherapy*, **1995**, 29, 299-310.0
2. Alves Galvao y col., *Cochrane Database of Systematic Reviews*, **2014**, 11, 1-121.
3. Zoidis y col., *Bioorganic & Medicinal Chemistry*, **2006**, 14, 3341-3348.