

Química

ESTUDO TEÓRICO SOBRE O MECANISMO DE REAÇÃO DA PENICILAMINA COM OS ÍONS Fe(II), Co(II), Ni(II), Cu(II) E Cr(II)

Isabela Aparecida Militani - 11º módulo de Química, UFLA, bolsista PIBIC.

Katia Júlia de Almeida - Orientadora DQI, UFLA. - Orientador(a)

Resumo

A penicilamina (PEN) é um medicamento que é usada no tratamento de várias doenças como artrite reumática, HIV e doença de Wilson.[1-5] Além disso, ela é usada como desintoxicante (antídoto) contra envenenamento por metais pesados.[1-5] Segundo estudos realizados, a PEN pode ter conformações e isomerismos diferentes, mostrando uma maior estabilidade para a sua forma zwitteriônica quando encontrada em soluções polares.[6] A PEN apresenta também isomeria óptica, sendo o enantiômero D a forma ativa no tratamento da doença de Wilson, enquanto a forma L é tóxica ao organismo podendo levar a morte.[6] Com o objetivo de investigar o mecanismo de interação da PEN com os íons Fe(II), Co(II), Ni(II), Cu(II) e Cr(II), análises computacionais foram realizadas considerando a reatividade desses íons frente à diferentes números e modos de interação com a PEN. Para isso, metodologias de cálculos DFT (Density Functional Theory) foram utilizadas com conjunto de base CBSB7 para todos os átomos. Os resultados mostram as condições termodinâmicas para todos os sítios de interação da PEN, considerando o número de coordenação variando até quatro moléculas da PEN. A partir das estruturas otimizadas, as energias de ligação para cada caso foram calculadas em fase gasosa e em solução aquosa. Os resultados teóricos obtidos mostram que as regras dos 18 elétrons e dos ácidos e bases macios e duros tendem a ser seguidas pela metodologia de cálculo utilizada. [1] E. Lange, L. Blizzard, A. Venn, H. Francis, G. Jones, Disease-modifying anti-rheumatic drugs and non-melanoma skin cancer in inflammatory arthritis patients: a retrospective cohort study, *Rheumatology* 55 (9) (2016) 1594–1600. [2] I.G. Metushi, X. Zhu, J. Uetrecht, D-penicillamine-induced granulomatous hepatitis in Brown Norway rats, *Mol. Cell. Biochem.* 393 (2014) 229–235. [3] J. Walshe, M. Penicillamine, The treatment of first choice for patients with Wilson's disease, *Mov. Disord.* 14 (4) (1999) 545-550. [4] J.M. Walshe, Penicillamine, a new oral therapy for Wilson's disease, *Am. J. Med.* 21(4) (1956) 487–495. [5] I. Sóvágó, B. Harman, A. Gergely, Complexes of sulphur-containing ligands. III. Formation of mixed valence complexes of copper with L-cysteine and its Derivatives, *Inorg. Chim. Acta* 46 (C) (1980) 107–108. [6] W. Weigert, H. Offermans, P. Scherberich, D-penicillamine production and properties, *Angew. Chem.* 14 (5) (1975) 330–336.

Palavras-Chave: Penicilamina, Estudo Teórico, Doença de Wilson.

Instituição de Fomento: Universidade Federal de Lavras

Link do pitch: <https://youtu.be/7Lz0VycQsCc>