



E450

ESTUDO CONFORMACIONAL DO PIROXICAM EM SOLVENTES COM DIFERENTES POLARIDADES

Kely F. de Souza (Bolsista FAPESP), Prof. Dr. Rogério Custodio (Orientador) e Francisco B. T. Pessine, Instituto de Química - IQ, UNICAMP

Piroxicam é um antiinflamatório e analgésico muito eficiente, utilizado no tratamento de artrite e outras doenças. Cerca de 1% dos pacientes sob tratamento com esta droga apresentam reações de foto-sensibilidade, de causas ainda desconhecidas. O objetivo deste projeto é investigar relações entre estrutura e propriedades eletrônicas de diferentes confôrmeros desta espécie em diferentes níveis de cálculo. Utilizou-se o método semi-empírico AM1 na construção de superfícies de potencial para determinar as estruturas mais estáveis entre duas formas tautoméricas. Quatro estruturas estáveis para cada forma foram identificadas apresentando os seguintes valores de entalpia de formação (em hartrees): -0,0685, -0,0648 -0,0643 e -0,0601 (forma ceto) e -0,0703, -0,0683 e -0,0683 (forma enólica). Estas estruturas foram submetidas à otimização de geometrias pelo método Hartree-Fock/cep-31g** e cep-31++g**. Inclusão de efeito de solvente através de modelo contínuo demonstrou que a estrutura enólica continua sendo a mais estável. Ligação de hidrogênio intramolecular confere maior planaridade e rigidez à molécula, diminuindo processos não radiativos e aumentando a fluorescência da forma enólica, em acordo com dados experimentais.

Piroxicam - Estrutura molecular - Efeito de solvente