

Efeito do pré-tratamento superficial em eletrodos de diamante na detecção eletroquímica do antidepressivo nortriptilina.

Paula Homem de Mello¹ (PQ), Renata A. Toledo² (PQ), Mauro Coelho dos Santos¹ (PQ), Luiz H. Mazo³ (PQ), Hugo B. Suffredini¹ (PQ)

*hugo.suffredini@ufabc.edu.br

¹Universidade Federal do ABC, Santo André, SP; ²Embrapa Instrumentação Agropecuária (CNPDIA), São Carlos, SP; ³Instituto de Química de São Carlos, Universidade de São Paulo (USP), São Carlos, SP.

Palavras Chave: diamante dopado com boro, nortriptilina, pré-tratamento, impedância

Introdução

Diferentes autores demonstraram que é fundamental a realização de um pré-tratamento superficial catódico, para que os eletrodos de diamante dopado com boro (DDB) respondam a testes eletroquímicos de maneira satisfatória^{1,2}.

Em contrapartida, estudos com o antidepressivo nortriptilina mostraram que o caráter hidrofóbico do eletrodo é fundamental para que o fármaco seja analisado por técnicas eletroquímicas, ou seja, o eletrodo de DDB deveria passar por um pré-tratamento anódico.

Para comprovar esta proposição, estudos de espectroscopia de impedância eletroquímica foram realizados em uma solução contendo nortriptilina após o eletrodo de diamante ser tratado catódica e anodicamente. Foram, ainda, realizados cálculos baseados na Teoria do Funcional da Densidade (DFT) para esclarecer o mecanismo de oxidação da nortriptilina. Para tanto, utilizou-se o funcional B3LYP, e a base 6-31G(d) e IEF-PCM (Integral Equation Formulation version of the Polarizable Continuum Model) para simular o solvente (água), conforme implementado no Gaussian 03.

Os estudos eletroquímicos foram conduzidos em uma célula convencional de um compartimento, utilizando-se um eletrodo de DDB como sensor, uma placa de Pt como contra-eletrodo e um eletrodo de Ag/AgCl como referência. Todos os experimentos eletroquímicos foram realizados em um potenciostato Voltalab PGZ401.

Resultados e Discussão

A Fig. 1 apresenta espectros de impedância eletroquímica para o material tendo recebido um pré-tratamento anódico (I) e catódico (II). Na primeira situação, define-se uma resistência de transferência de carga da ordem de $900 \text{ k}\Omega \text{ cm}^{-1}$, mostrando a ocorrência de processo faradaico no sistema. Em contrapartida, para o eletrodo de diamante tratado catódicamente (II), um processo puramente capacitivo pode ser observado. A Fig. 2 mostra que o HOMO da nortriptilina tem contribuições principalmente dos átomos dos anéis,

31ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

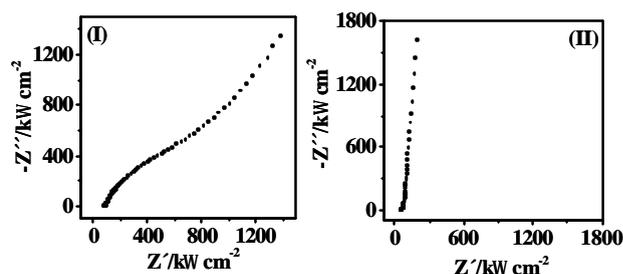


Figura 1 – Espectros de impedância (1mHz a 100 kHz) para o eletrodo de diamante tratado anódica (1) e catódicamente (2) em solução $5,6 \times 10^{-4} \text{ mol L}^{-1}$ de nortriptilina (tampão BR, pH 6).

ou seja, da parte apolar da molécula, indicando que esta região deveria interagir com o eletrodo para que a oxidação ocorra, comprovando que é necessária uma contribuição hidrofóbica do eletrodo para que o processo faradaico ocorra.

Energia HOMO = -0,22 eV



Figura 2 - Representação gráfica para o HOMO da nortriptilina.

Em consequência disso, o material tratado catódicamente não tem a capacidade de interagir com o sítio apolar da molécula.

Conclusões

Os espectros de impedância mostraram que a nortriptilina pode ser estudada utilizando-se eletrodos de diamante, desde que este sofra um pré-tratamento anódico. As propriedades calculadas comprovaram que para que a nortriptilina se oxide, é necessário que a região apolar, onde o HOMO se localiza, interaja com o eletrodo.

Agradecimentos

FAPESP, CNPq e UFABC.-----

¹ Suffredini, H. B., et al, Elect. Acta. **2004**, 4021, 49.

