

Detecção do captopril através de uma estratégia baseada em um ensaio de competição

Eliane Torri¹ (PG), Celso Rodrigo Nicoleti¹ (PG) e Vanderlei Gageiro Machado² (PQ)*
vander@gmc.ufsc.br

¹Departamento de Química, Universidade Regional de Blumenau, FURB, Blumenau, SC, 89012-900

²Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Catarina, UFSC, Florianópolis, SC, 88040-900

Palavras Chave: Ensaios de competição, quimiossensores cromogênicos, captopril, detecção visual.

Introdução

Os ensaios baseados na competição de indicadores coloridos/fluorescentes e de moléculas neutras por sítios receptores vêm merecendo bastante destaque.¹ Uma das vantagens desses ensaios reside no fato de que a detecção do analito acarreta mudanças na coloração do meio, permitindo o desenvolvimento de estratégias de detecção do analito. Neste sentido, foi verificada a potencialidade da interação do 7,7,8,8-tetracianoquinodimetano (TCNQ), um forte aceitador de elétrons, com o di-hidroximetil-di-(2-pirrolil) metano (DMPM), um doador de elétrons,² para a montagem de um quimiossensor cromogênico para o captopril, um fármaco largamente usado como anti-hipertensivo.

Resultados e Discussão

O DMPM foi obtido conforme descrição da literatura.² Inicialmente, foi preparada uma solução de TCNQ (2×10^{-5} mol dm⁻³) e com ela foi feita a solução de DMPM (2×10^{-4} mol dm⁻³) em acetonitrila (MeCN) e em mistura de MeCN com água (10%, vol/vol). Após 24 horas, tempo necessário para o equilíbrio da reação, foi observada uma mudança nítida na coloração, de um amarelo pálido para azul, sugerindo que o TCNQ tenha formado com o DMPM um complexo de transferência de carga π - π . Em ambos os casos a solução azul tornou-se amarela pálida com a adição de captopril ao meio (Figura).

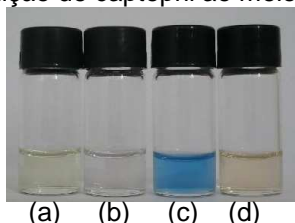
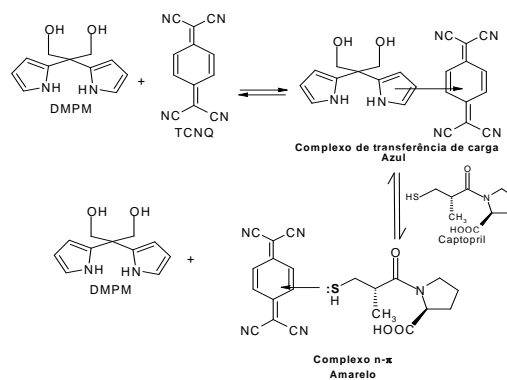


Figura. (a) Solução de TCNQ; (b) solução de DMPM; (c) solução do complexo TCNQ:DMPM, após 24 horas; (d) solução do complexo TCNQ:DMPM com captopril adicionado.

Foi realizada uma titulação entre o captopril e o TCNQ a fim de obter as estequiometrias envolvidas na reação. Os dados experimentais foram ajustados a modelos matemáticos que levaram a obtenção das constantes de associação. Em MeCN foi observada uma estequiometria do tipo 1:2 e uma constante de associação $K_{12} = (7,85 \pm 0,38) \times 10^6$ dm⁶ mol⁻², enquanto a adição de água ao meio fez com que a estequiometria fosse alterada para o tipo 3:4³ Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

1:1, ou seja, uma molécula de TCNQ para 1 molécula de captopril e a constante de ligação passou a ser $K_{11} = 7,65 (\pm 0,47) \times 10^4$ dm³ mol⁻¹. A ligação do captopril ao TCNQ ocorre através do par de elétrons disponível no enxofre (Esquema), visto que o grupamento mercapto, presente no captopril, interage com o orbital molecular do tipo π do TCNQ. Essa interação é favorecida devido à diferença energética entre o LUMO no TCNQ e o HOMO no captopril ser bastante pequena. Um estudo foi ainda feito sobre as condições experimentais de formação do complexo entre TCNQ e DMPM. Foi verificado que se a solução dos dois compostos é mantida no escuro, que o complexo não se forma, passando a se formar lentamente se exposta à luz ambiente. A exposição da solução a uma lâmpada UV 365 nm levou a uma importante aceleração na velocidade da reação, levando a um $k_{obs} = 1,80 (\pm 0,05) \times 10^{-4}$ s⁻¹. O mesmo ocorreu com o uso de uma lâmpada incandescente de 60 W ($k_{obs} = 1,38 (\pm 0,04) \times 10^{-4}$ s⁻¹).



Esquema. Ensaio de competição para o captopril.

Conclusões

O complexo envolvendo TCNQ e DMPM se mostrou eficiente na montagem de um quimiossensor cromogênico para a detecção do captopril. Este sistema de detecção pode ser aprimorado para utilização como um método laboratorial para o controle de qualidade deste fármaco.

Agradecimentos

À UFSC, FURB, à Secretaria de Educação do Estado de SC e ao CNPq.

¹Nguyen, B.T.; Anslyn, E.V. *Coord. Chem. Rev.* **2006**, *250*, 3118-3127.

²Guo, Y.; et al. *Inorg. Chem. Commun.* **2004**, *7*, 333-336.