



Sessão de Química
Dia 03/07/13 – 13h30 às 18h30
Unila-PTI - Bloco 03 – Espaço 03 – Sala 02

Estudio computacional de las propiedades del Pirimetanil y sus productos de degradación a partir de métodos de estructura electrónica

Gisselle María Morínigo Egusquiza*

Universidade Federal da Integração Latino-Americana

Ciencias Biológicas

E-mail: morinigo.gisselle@gmail.com

Norma Caballero

Universidade Federal da Integração Latino-Americana

Instituto Latino-Americano de Ciências da Vida e da Natureza

E-mail: norma.caballero@unila.edu.br

RESUMO

Los plaguicidas son productos con compuestos químicos cuyas estructuras moleculares son complejas y activas biológicamente, sin embargo el cálculo de algunas propiedades no pueden realizarse experimentalmente, lo que deriva a la utilización de la química computacional. El presente estudio tiene como objetivo determinar la actividad biológica de los compuestos originados a partir de la degradación del pirimetanil, clasificado como fungicida, perteneciente al grupo químico de las pirimidinas. Para tal efecto se recurre a la utilización del modelado molecular, que comprende métodos teóricos y procesos computacionales, creando, imitando y prediciendo el comportamiento de moléculas que abarcan desde elementos simples hasta grandes moléculas biológicas. La aplicación de la química computacional envuelve un fácil estudio del comportamiento, así como la comprensión del posible mecanismo de acción de estas moléculas. Para ello, fueron utilizados algunos programas computacionales, como el HyperChem, ChemSketch, que permitieron el modelado molecular de los nueve fragmentos utilizados, a partir de degradación experimental del pirimetanil, y el posterior cálculo de propiedades con métodos de estructura electrónica. Las estructuras moleculares han sido diseñadas con el programa ChemSketch, la optimización de las geometrías fueron realizadas con el programa HyperChem con los métodos semi-empíricos AM1 y PM3, mediante éstos se pudieron obtener cálculos relativos a las propiedades de cada estructura, a modo de lograr obtener un cuadro comparativo entre ellos, incluyendo la energía, refractividad, polarizabilidad; Log P; energía de hidratación, masa, entre otros; lo que permitió visualizar cuáles eran las estructuras con propiedades más próximas a la estructura original, en vista a que cada conformación y disposición de enlaces confiere propiedades distintas, que serán asimiladas por el medio ambiente conforme a las mismas, teniendo en cuenta el grado de toxicidad y sus posteriores consecuencias. Posterior a eso, se ha realizado una comparación con otros fungicidas: 2-amino-4,6-dimethylpyrimidine, mepanipirina y ciprodinil, cuya estructuras moleculares son semejantes al pirimetanil, mediante la utilización de informaciones contenidas en PPDB Pesticide Properties Data Base. Posterior a esto se utilizó el programa SigmaPlot, para hallar la regresión lineal ajustando la relación entre una variable dependiente de Y, y variables independientes de X, para desenvolver una ecuación con fines predictivos; comparando sus propiedades en relación a la masa de una molécula X. Para el análisis se tuvieron en cuenta el Log P, y el DT50 de las moléculas, lo que permite

*Agradecimiento a la Unila y a la Fundación Araucária (FA) por la bolsa concedida.

determinar el nivel tóxico de las mismas. En una primera aproximación se ha encontrado que los fragmentos P4, P7, P8-P9, y P9 producidos en la degradación del pirimetanil, presentan una tendencia a ser potencialmente más tóxicos que su precursor, sin embargo los estudios deberán continuar para llegar a resultados más factibles en cuanto a la actividad biológica de los mismos.

Palavras-chave: *Log P, DT50, plaguicida, optimización, tóxico.*