



DETERMINACIÓN DE LA CAPACIDAD ANTIOXIDANTE PRIMARIA Y SECUNDARIA DE LA ESTAVUDINA, UN ENFOQUE TEÓRICO.

Annia Galano,¹ Adriana Pérez-González,¹ Eduardo Gabriel Guzmán López¹

¹*Departamento de Química, División de Ciencias Básicas e Ingeniería. Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, México.*

e-mail: egg1@xanum.uam.mx

Se realizó un estudio de la capacidad antioxidante primaria y secundaria de la estavudina, antiretroviral utilizado para prevenir y tratar el VIH/SIDA que pertenece a la familia de los inhibidores no nucleosídicos de la transcriptasa inversa. A pesar de que esta es una de las drogas antiretrovirales más importantes en el mercado no existe información disponible en la literatura acerca de su capacidad antioxidante.

Para este estudio se utilizó la metodología QM-ORSA (Quantum mechanics based test for overall free radical scavenging activity) que ha sido validada por comparación con datos experimentales y ha demostrado tener errores del mismo orden de magnitud que estos. Además esta metodología permite realizar estudios de una forma sistemática y la obtención de parámetros cinéticos. Se emplearon los radicales metoxilo e hidropoxilo los cuales poseen diferentes características de reactividad y que sirven para modelar diferentes reacciones en el cuerpo humano. Los mecanismos que se modelaron fueron los de transferencia de hidrógeno (HT), transferencia electrónica (SET) y formación de aducto radicalario (RAF). Para la capacidad antioxidante secundaria se modeló la habilidad quelante de la estavudina frente al cobre, de forma mono- y bi-dentada. Todos los cálculos se realizaron empleando modelos de solvente: de agua para imitar medios acuosos y de pentiletanoato para medios lipídicos. Los resultados obtenidos aportan datos termodinámicos, cinéticos y comparaciones con antioxidantes de referencia incluyendo Trolox.