

# Protocolo computacional para o estudo do deslocamento químico de Tc-99 em complexos de tecnécio com potencial aplicação radiofarmacêutica

Taís F. C. B. de Andrade<sup>1</sup> (PG), Hélio F. Dos Santos<sup>2</sup> (PQ), Célia Fonseca Guerra<sup>3</sup> (PQ), Diego F. S. Paschoal<sup>1\*</sup> (PQ)

diegopaschoal01@gmail.com ou diegofspaschoal@macae.ufrj.br

<sup>1</sup>Núcleo de Química Teórica e Computacional de Macaé, Polo Ajuda, Instituto Multidisciplinar de Química, Centro Multidisciplinar UFRJ-Macaé, Universidade Federal do Rio de Janeiro, 27.971-525, Macaé, RJ, Brasil.

<sup>2</sup>NEQC: Nucleo de Estudos em Química Computacional, Departamento de Química - ICE, Universidade Federal de Juiz de Fora, 36.036-900 Juiz de Fora, Minas Gerais, Brasil.

<sup>3</sup>Department of Theoretical Chemistry, Amsterdam Institute of Molecular and Life Sciences (AIMMS), Amsterdam Center for Multiscale Modeling (ACMM), Vrije Universiteit Amsterdam, 1081 HV Amsterdam, The Netherlands.

Palavras-Chave: Radiofármacos, Tecnécio, RMN, Protocolo computacional.

## Introdução

O <sup>99m</sup>Tecnécio (<sup>99m</sup>Tc) é o radionuclídeo mais utilizado em radiofármacos empregados em medicina diagnóstica, onde é aplicado como marcador radioativo. Pode existir em 9 estados de oxidação, o que lhe confere a possibilidade de formar complexos de coordenação com numerosos agentes quelantes, assumindo geometrias distintas<sup>1</sup>.

A espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) é amplamente empregada para sondar os ambientes químicos dos complexos de <sup>99</sup>Tc<sup>1</sup>. Assim, este estudo visa uma análise dos aspectos relevantes, nível de teoria, função de base, efeitos relativísticos e do solvente, envolvidos na previsão teórica dos parâmetros de RMN de complexos de <sup>99</sup>Tc com potencial aplicação radiofarmacêutica.

## Resultados e Discussão

O presente trabalho<sup>1</sup> propôs a elaboração de protocolos computacionais para a previsão teórica dos deslocamentos químicos em RMN do núcleo de <sup>99</sup>Tc. Inicialmente, foi realizada a construção dos protocolos computacionais para a previsão da geometria e do RMN de complexos de Tc selecionados como modelos. Foram construídos protocolos computacionais utilizando abordagens relativísticas (Modelo 1 - SO-ZORA-SSB-D/TZ2P-ZORA/COSMO//SC-ZORA-B3LYP/TZP-ZORA/COSMO) e não relativísticas (Modelo 2 - B3LYP/NMR-DKH/IEF-PCM-(UFF)//TPSS/def2-SVP/IEF-PCM(UFF)), onde  $\delta^{99}\text{Tc} = \sigma_{\text{ref}} - \sigma_{\text{calc}}$ , com o complexo [TcO<sub>4</sub>] em D<sub>2</sub>O sendo utilizado como referência. Também foi proposto um modelo empírico não relativístico (Modelo 3 - B3LYP/NMR-DKH/IEF-PCM(UFF)//TPSS/def2-SVP/IEF-PCM(UFF)), onde  $\delta^{99}\text{Tc} = -2218,4 - 0,9256 \times \sigma^{99}\text{Tc}$ , com o objetivo de recuperar parte dos efeitos relativísticos não considerados no Modelo 2. Além disso, foi construído

um novo conjunto de funções de base gaussianas relativísticas NMR-DKH para o átomo de tecnécio. Os cálculos relativísticos foram executados no programa ADF 2019.3 e os não relativísticos no programa GAUSSIAN 09 Rev. D.01.

Os modelos propostos foram aplicados a um conjunto de 41 complexos de Tc, nos estados de oxidação 0, I e V. Os resultados calculados (Figura 1) mostram desvios absolutos médios e desvios relativos médios de 67 ppm e 4,8%, no Modelo 1, 92 ppm e 6,2%, no Modelo 2 e 65 ppm e 4,9%, no Modelo 3.

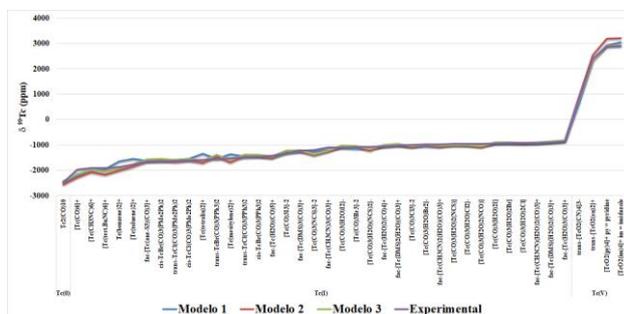


Figura 1.  $\delta^{99}\text{Tc}$  calculados com os modelos estudados.

## Conclusões

O presente trabalho propôs protocolos computacionais para a previsão do deslocamento químico de Tc-99 em complexos de tecnécio. Os resultados calculados mostram que os Modelos 1 e 3 são excelentes alternativas para o estudo de RMN em complexos de Tc(0), Tc(I) e Tc(V).

## Agradecimentos

Os autores gostariam de agradecer as agências de fomento FAPERJ (E-26/010.002261/2019 – EMERGENTES), CNPq, CAPES (Código de Financiamento 001) e NWO - Netherlands pelo apoio.

<sup>1</sup> De Andrade, T. F. C. B. *J. Phys. Chem. A* **2022**, *126*, 5434.