XXX Encontro Anual de Iniciação Científica
VII Encontro Anual de Iniciação Científica Júnior
eaic 2021

COMPLEXOS DE INCLUSÃO NISTATINA- (α, β, γ) -CICLODEXTRINA: UM ESTUDO TEÓRICO FEITO VIA MÉTODOS SEMI EMPÍRICOS.

Mateus de Oliveira Neto (PIBIC/UEPG), Alexandre Camilo(Orientador), e-mail: acamilo@uepg.br

Universidade Estadual de Ponta Grossa. Departamento de Química

Área Ciências Exatas e da Terra, subárea Físico-Química, Química Teórica.

Palavras-Chave: *Ciclodextrina alpha, beta, gama, Nistatina, Complexos.*

Resumo

Ciclodextrinas são um grupo de oligossacarídeos cíclicos, os quais têm sido reconhecidos como excipientes farmacêuticos de grande utilidade. Apresentam uma cavidade central hidrofóbica, cuja estrutura permite formar complexos de inclusão estáveis. Neste projeto fora estudados métodos para a inclusão da Nistatina nos grupos das α-CD; β-CD e γ-CD (alfa Ciclodextrina; beta Ciclodextrina e gama Ciclodextrina respectivamente); O estudo abrange uma série de modelagens e simulações computacionais e análises de resultados por métodos Semi Empíricos, bem como o uso de softwares como MOPAC e ORCA para executar cálculos e realizar a obtenção de dados necessários para o avanço do estudo. Os resultados obtidos foram inseridos em Softwares de análises químicas e físicas a partir de estruturas de compostos, como o Gabedit, onde é possível obter uma interface gráfica de cálculos e suporte para a maior parte de formatos de arquivos moleculares, tais como Galssian, Orca e Mopac.

Introdução

A Ciclodextrina natural para formação de complexos de inclusão mais vista na comunidade farmacêutica é a β-CD (Beta-Ciclodextrina) (GAWALI et al., 2009), justamente pelo seu elevado número de íons hidroxilas, quatorze secundárias e sete primárias, onde estas são grandes pontos de reação que permitem a criação de modificações estruturais, funcionalizando o anel macro cíclico podendo assim formar uma grande gama de estruturas adaptadas a novos sistemas terapêuticos (VEIGA; SALTÃO, 2001). Porém neste estudo veremos o comportamento de complexos das Ciclodextrinas em a forma de hexâmeros, heptâmeros e octâmeros (α-CD; β-CD e γ-CD) com a inclusão da Nistatina (fármaco antifúngico) e analisar qual das estruturas se comporta melhor em termos de toxicidade e solubilidade.

Material e Métodos

Neste estudo serão analisadas as moléculas da *Nistatina; Ciclodextrinas alfa, beta e gama,* suas estruturas moleculares serão feitas a partir de um software de modelagem computacional, o Avogadro®, que é um avançado editor e visualizador de moléculas, projetado para uso em química computacional, modelagem molecular, bioinformática, ciência de materiais e outras áreas relacionadas (HANWELL et al., 2012).

Resultados e Discussão

As moléculas e complexos foram montados de maneira satisfatória, em vista que a otimização não acarretou erros de formação, como ligações interrompidas ou distorção entre os ângulos dos eixos XYZ, assim também não tendo problemas com a inclusão de duas Ciclodextrinas em ambas as cavidades da Nistatina, vimos então que seria possível uma inclusão sem maiores problemas.

Conclusão ou Conclusões

O estudo deu os resultados esperados, onde apenas na Ciclodextrina Beta seria a melhor opção para gerar um complex de inclusão satisfatório e útil.

Agradecimentos

UEPG, PIBIC, ao meu orientador Alexandre Camilo Junior e ao meu colega Luiz Fernando.

HANWELL, M. D.; CURTIS, D. E.; LONIE, D. C.; VANDERMEERSCH, T.; ZUREK, E.; HUTCHISON, G. R. Avogadro: An advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform. J. Cheminform. 2012.

JANSOOK, P.; OGAWA, N.; LOFTSSON, T. Cyclodextrins: structure, physicochemical properties and pharmaceutical Applications. International Journal of Pharmaceutics, v. 535, p. 272-284, 2018.

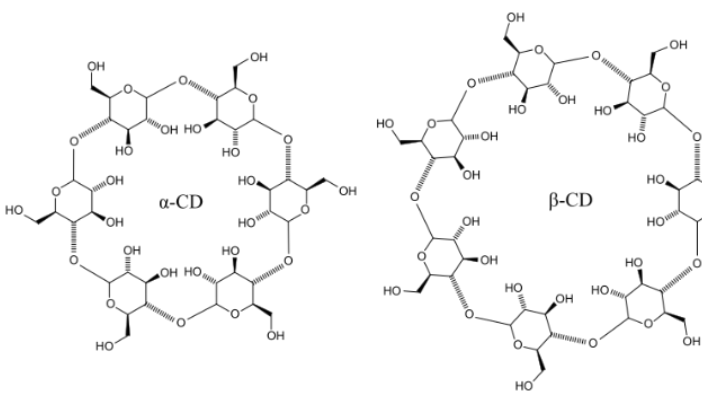


Figura 1- Ciclodextrinas α, β

Universidade Estadual de Ponta Grossa
ISSN 1676-0093
propesp PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO