

Química

Modelagem molecular da inclusão de análogos da xantona em ciclodextrina

Leonardo Makoto Mizuno - 4º módulo de Química (bacharelado), UFLA, iniciação científica voluntária.

Cleber Paulo Andrada Anconi - Orientador DQI, UFLA. - Orientador(a)

Resumo

A xantona (9H-xanthen-9-one) é um composto heterocíclico aromático natural amplamente encontrado em plantas, fungos e líquens, cujos derivados apresentam atividades farmacológicas relevantes, como efeitos antioxidantes, anti-inflamatórios e antimicrobianos. Para melhorar essas propriedades, empregam-se ciclodextrinas (CDs), oligossacarídeos cíclicos formados por unidades de D-glicose conectadas por ligações glicosídicas Alfa(1-4), cuja cavidade interna hidrofóbica e superfície externa hidrofílica possibilitam a formação de complexos do tipo host-guest. Nesse contexto, destacam-se as tioxantonas, análogos da xantona em que o oxigênio central é substituído por enxofre, conferindo propriedades distintas, como ação fotoiniciadora e fotocatalítica. Este estudo investigou a inclusão de quatro tioxantonas, 9H-Thioxanthene (Tx0), Thioxanthen-9-one (Tx1), Thioxanthen-9-one,10-oxide (Tx2) e Thioxanthen-9-one-10,10-dioxide (Tx3), com a Beta-ciclodextrina (Beta-CD), visando avaliar a estabilidade relativa desses complexos supramoleculares. Os complexos de inclusão iniciais foram gerados com o software UD-APARM, produzindo 1800 arranjos distintos por variação de parâmetros intermoleculares e angulares. Em seguida, as geometrias foram otimizadas pelo método semiempírico GFN2-xTB em vácuo e em água (solvatação ALPB). A caracterização geométrica foi realizada com o software APARM, assegurando a consistência estrutural. Ao final, as constantes de equilíbrio (K) foram determinadas pelo método de equilíbrios múltiplos, considerando diferentes modos de inclusão, obtendo-se valores de log K para Tx0@Beta-CD, Tx1@Beta-CD, Tx2@Beta-CD e Tx3@Beta-CD correspondentes a 5,18; 7,54; 10,4 e 13,1, respectivamente, evidenciando um aumento progressivo da estabilidade. Entretanto, novos cálculos devem ser realizados para a construção de uma curva de calibração que valide os dados obtidos, além de estudos mais aprofundados para compreender melhor o sistema.

Palavras-Chave: Tioxantona, UD-APARM, Estudo Teórico.

Instituição de Fomento: UFLA

Link do pitch: https://youtu.be/r9CB_6an0hs