

# ESTUDO TERMODINÂMICO DA INCLUSÃO DO DODECIL SULFATO DE SÓDIO EM BETA-CICLODEXTRINA

Larissa Helena da Rocha Meira<sup>1</sup> (PG)\*, Frederico B. de Sousa<sup>1</sup> (PQ). laribiomedica@gmail.com

<sup>1</sup>Instituto de Física e Química, Universidade Federal de Itajubá, Itajubá - MG, 37500-903.

Palavras Chave: Lauril sulfato de sódio; composto de inclusão,  $\beta$ -Ciclodextrina, calorimetria de titulação isotérmica, FTIR-ATR.

## Abstract

Thermodynamic study the inclusion of sodium dodecyl sulfate in  $\beta$ -cyclodextrin. Thermodynamics investigation of inclusion complexes are studied to predict structure, spontaneity and the stoichiometry.

## Introdução

Excipientes farmacêuticos podem interagir entre si afetando a estabilidade, biodisponibilidade, eficácia e segurança terapêutica do medicamento.<sup>1</sup> As ciclodextrinas (CDs) formam compostos de inclusão (CIs) com diversos fármacos, sendo as CDs consideradas excipiente e classificadas como estabilizante e solubilizante.<sup>2</sup> Assim, o estudo termodinâmico da inclusão de excipientes em CDs é de suma importância para garantir a eficácia e segurança do medicamento. A calorimetria de titulação isotérmica (ITC) fornece a caracterização físico-química da interação entre moléculas, como as CDs e o dodecil sulfato de sódio (SDS, Fig. 1). Além de possibilitar o estudo da competição entre esse possível CI e o fármaco presente no medicamento. Logo, o CI entre SDS e a  $\beta$ -ciclodextrina ( $\beta$ CD) foi realizada por ITC em diferentes temperaturas e por espectroscopia de infravermelho por reflectância atenuada (FTIR-ATR). Os experimentos de ITC foram realizados em duplicata com  $\beta$ CD 10 mM e SDS 0,5 mM.

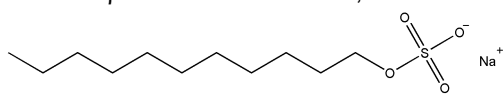


Figura 1. Estrutura do dodecil sulfato de sódio.

## Resultados e Discussão

Conforme a Tabela 1 nota-se que o aumento da temperatura ocasiona uma diminuição da estequiometria ( $n$ ) e da constante de associação ( $K$ ), bem como um aumento da contribuição entálpica ( $\Delta H$ ) e diminuição da entrópica ( $T\Delta S$ ). A análise do espectro de FTIR-ATR (Fig. 2) do CI na razão 1:1 SDS:  $\beta$ CD da indícios de uma possível inclusão do SDS em  $\beta$ CD. Devido a diminuição da intensidade das bandas referentes estiramento ( $\nu$ ) de O-H ( $\sim 3500\text{cm}^{-1}$ ) e deslocamento das referentes ao  $\nu$  C-O-C de  $1150-1020\text{cm}^{-1}$  para  $1153-1026\text{cm}^{-1}$  da  $\beta$ CD no CI, bem como a diminuição da intensidade das bandas relativas ao  $\nu$  C-H ( $\sim 2910 -$

$2840\text{cm}^{-1}$ ) e de S=O ( $\sim 1214\text{cm}^{-1}$ ) do SDS no CI e o desaparecimento da banda de  $\nu$  S-O-C ( $\sim 1080\text{cm}^{-1}$ ) do SDS no composto. Analisando todos os dados pode-se sugerir que a  $25^\circ\text{C}$  mais de um tipo de CI possa ser formado conforme o valor de  $n$  e modificações no FTIR-ATR, com a interação do grupo alquil e/ou do grupo sulfato na cavidade da  $\beta$ CD. Sugere-se que o aumento da temperatura favoreça a formação de um tipo de CI mais estável e mais exotérmico ( $\Delta H$  mais negativa).

Tabela 1. Parâmetros termodinâmicos da interação entre SDS e  $\beta$ CD em diferentes temperaturas

T (°C)	n	T $\Delta S$ (kJ/mol)	$\Delta H$ (kJ/mol)	$\Delta G$ (kJ/mol)	K (M <sup>-1</sup> )
25	1,70 $\pm$ 0,007	17,34 $\pm$ 0	-7,64 $\pm$ 0,04	-24,99 $\pm$ 0,02	23950 $\pm$ 212,13
37	0,97 $\pm$ 0	9,38 $\pm$ 0,23	-14,87 $\pm$ 0,19	-24,25 $\pm$ 0,05	12150 $\pm$ 212,13
45	0,74 $\pm$ 0,01	6,16 $\pm$ 0,22	-18,54 $\pm$ 0,14	-24,72 $\pm$ 0,08	11450 $\pm$ 353,55

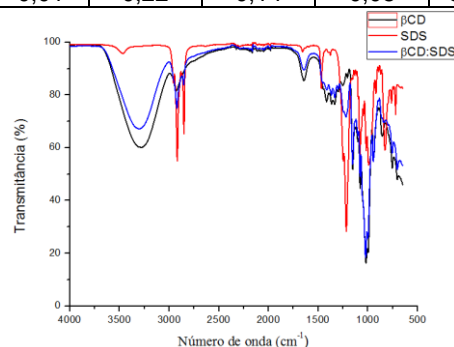


Figura 2. FTIR-ATR da  $\beta$ CD, do SDS e do composto SDS:  $\beta$ CD (1:1).

## Conclusões

Observou-se a possível formação de CI SDS:  $\beta$ CD por FTIR-ATR. Experimentos de ITC a diferentes temperaturas forneceram os dados termodinâmicos, sugerindo mais de um tipo de sistema supramolecular.

## Agradecimentos

Ao CNPq, à CAPES, FAPEMIG e a RQ-MG.

<sup>1</sup>Steinberg, M., et al. *Regulatory toxicology and pharmacology*, 1996, 24, 149-154.

<sup>2</sup>Lofsson, T.; Brewster, M. E. *Journal of pharmaceutical sciences*, 2012, 101, 3019-3032.