

Proposição de arranjos estruturais para complexos de inclusão entre β -CD e Ecstasy.

Willian T. G. Novato^{1*}(IC), Hélio F. dos Santos¹(PQ)
 *email: willnovato@hotmail.com

¹ Departamento de Química– ICE – Universidade Federal de Juiz de Fora – CEP:36036-330 – Juiz de Fora - MG

Palavras Chave: Inclusão, ecstasy, ciclodextrina.

Introdução

É crescente o uso de complexos de inclusão em processos de liberação controlada em drogas que necessitam de um tempo ótimo de atuação no organismo¹. Devido a alta dependência química e psíquica de usuários de ecstasy (MDMA), o uso de agentes químicos que possam "sequestrar" moléculas seria bastante interessante para a realização do tratamento de desintoxicação²⁻³. Neste sentido, o presente trabalho avalia a estrutura e espontaneidade de complexos de "hóspede-hospedeiro" entre a molécula de β -CD e S-MDMA sendo um sistema possivelmente aplicado a este tipo de situação, via Dinâmica Molecular Clássica.

Resultados e Discussão

Os ensaios teóricos partiram de 0K aumentando a temperatura de 50K a cada variação de tempo alternado entre 50 e 200ps e posteriormente, mantidos por 1000ps a 298,15K. A aproximação utilizada foi o estado gasoso e as simulações foram realizadas no *software* MacroModel® sob o campo de força AMBER*.

Os complexos se mostraram espontâneos e bem organizados estruturalmente. Tanto o valor de Dist.HH_{(host-guest)média} quanto do Raio de Rotação mantiveram-se em pequenos desvios, após a inclusão, em temperatura ambiente. Os dois modos de inclusão foram bastantes favoráveis, tendo em vista uma alta energia de complexação.

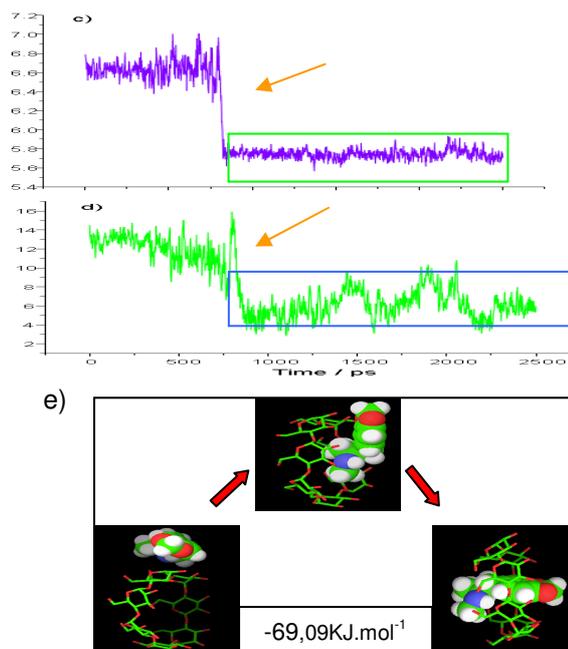
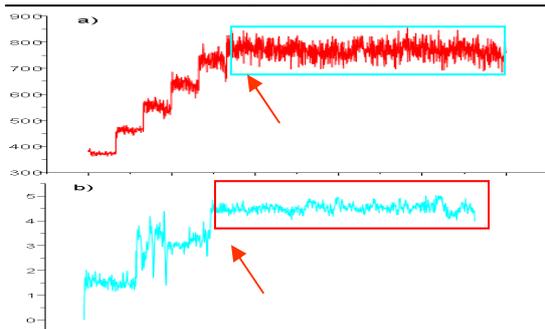
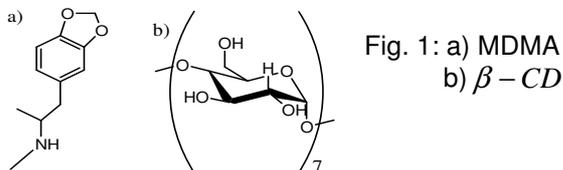


Fig. 2: a) Energia (KJ.mol⁻¹) x Tempo
 b) RMS (10⁻¹⁰m) x Tempo
 c) Raio de Rotação(10⁻¹⁰m) x Tempo
 d) Dist.HH_{(host-guest)média}(10⁻¹⁰m)x Tempo
 e) Imagem do complexo sendo formado à partir da seta indicada

Conclusões

O sistema se mostrou totalmente espontâneo, sendo viável investir em complexos de inclusão deste tipo. Seria uma possível contribuição em auxílio ao tratamento de desintoxicação de narcóticos anfetamínicos.

Agradecimentos

À Cnpq, Fapemig, Propesq, Capes e a UFJF.

¹Fraceto, L. L.; Gonçalves, M. M.; Moraes, C. M.; De Araújo, D. R.; Zanella, L.; De Paula, E.; Pertinhez, T. A.; *Quim. Nova*, 30, No 5, **2007**, 1203.

²Murnane, K. S.; Murai, N.; Howell, L. L.; Fantegrossi, W. E.; *J. Pharm. And Exp. Therapeutics*, 331, No 2, **2009**, 717.

³Raffaini, G.; Ganazzoli, F.; Malpezzi, L.; Fuganti, C.; Fronza, G.; Panzeri, W.; Mele, A.; *J. Phys. Chem. B*, 113, **2009**, 9110.