

CÁLCULO DO ESPECTRO DE ABSORÇÃO E EMISSÃO DA NITAZOXANIDA

Congresso Brasileiro De Bioquímica Industrial., 1ª edição, de 26/01/2021 a 28/01/2021
ISBN dos Anais: 978-65-86861-74-7

MORAIS; JEFFERSON LORENÇONI DE ¹, LOPES; Yago Francisco ², SOUSA; Wilker Cássio ³, VALVERDE; Clodoaldo ⁴, SILVA; Poliana Maia da ⁵

RESUMO

A nitazoxanida é uma benzamida sintética com atividade antiprotozoária. Sua fórmula molecular é $C_{12}H_9N_3O_5S$ e seu peso molecular 307,28 g/mol. A nitazoxanida exerce sua atividade antiprotozoária interferindo na reação de transferência de elétrons dependente da piruvato ferredoxina / flavodoxina oxidoreductase, que é essencial para o metabolismo energético anaeróbico. A enzima PFOR reduz a nitazoxanida, prejudicando assim o metabolismo energético. No entanto, a interferência com a reação de transferência de elétrons dependente da enzima PFOR pode não ser a única via pela qual a nitazoxanida exibe atividade antiprotozoária. A nitazoxanida é ativa contra *Giardia lamblia* e *Cryptosporidium parvum*. A nitazoxanida é um antimicrobiano com atividade contra vários vermes parasitas e protozoários, usado predominantemente nos Estados Unidos no tratamento da giardíase e da criptosporidiose. Não foi relatado que a terapia com nitazoxanida causa aumentos das aminotransferases séricas durante a terapia ou lesão hepática clinicamente aparente. A nitazoxanida pertence à classe de medicamentos conhecidos como tiazolídeos. A nitazoxanida (NTZ) é uma droga anti-infecciosa de amplo espectro que modula marcadamente a sobrevivência, o crescimento e a proliferação de uma variedade de protozoários extracelulares e intracelulares, helmintos, bactérias anaeróbias e microaerofílicas, além de vírus. Este medicamento é eficaz no tratamento de infecções gastrointestinais, incluindo *Cryptosporidium parvum* ou *Giardia lamblia* em indivíduos saudáveis. Geralmente é bem tolerado. A Nitazoxanida é um tratamento padrão de primeira linha para doenças causadas por infecção por *C. parvum* ou *G. lamblia* em adultos e crianças saudáveis (não imunossuprimidos) e também pode ser considerada no tratamento de doenças causadas por outros protozoários ou helmintos. Recentemente, essa droga tem sido estudada como um agente antiviral de amplo espectro devido à sua capacidade de inibir a replicação de vários vírus de RNA e DNA. O objetivo deste trabalho é de realizar cálculos do espectro de absorção e emissão na faixa do ultravioleta visível no meio aquoso. Serão utilizados cálculos quânticos no método da Teoria do Funcional da Densidade (DFT), mais versáteis disponíveis em física da matéria condensada, física computacional e química computacional devido à generalidade de seus fundamentos e a flexibilidade de implementação. Sendo utilizado o programa de computador Gaussian 16 no funcional matemático B3LYP com a base 6-311+G (d,p). Levando a impressão dos resultados realizado no programa de computador, possamos compreender e ver os pontos que mais absorveram e os que não absorveram e entender o funcionamento deste composto. E ver os pontos que mais as ondas eletromagnéticas conseguem acionar seu funcionamento. Chegando em uma conclusão para um melhoramento de eficiência no fármaco e desenvolvimento dele próprio.

PALAVRAS-CHAVE: Absorção, Nitazoxanida, Espectrometria.

¹ UNIVERSIDADE ESTADUAL DE GOIÁS, lorenconi12112009@hotmail.com

² UNIVERSIDADE ESTADUAL DE GOIÁS, yagolopes-f@hotmail.com

³ Instituto Federal de Goiás, eng.wilker@yahoo.com

⁴ Universidade Paulista, valverde@ueg.br

⁵ UNIVERSIDADE ESTADUAL DE GOIÁS, polianamaia07@hotmail.com