

19 a 23

JUNHO

XI

SEMANA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA DA UFPA

ESTRUTURAS E VIBRAÇÕES DE AZITROMICINAS

Francisco Ferreira de Sousa

UFPA

Resumo

A azitromicina (AZM) é um antibiótico da classe das azalidas e é um dos fármacos muito usado em várias terapias clínicas devido a sua eficiência em relação a outros tipos de antibióticos, bem como seu baixo efeito colateral sobre o organismo humano. Recentemente, a AZM foi associada com outros fármacos no combate às infecções derivadas da Covid-19, conhecida como severe acute respiratory syndrome coronavirus 2 (SARS-Cov-2). Assim como outros fármacos, AZM pode ser modificada ou sintetizada a partir de diversos processos de síntese, podendo apresentar diversas estruturas. Do ponto de vista físico, diferentes estruturas moleculares no estado cristalino podem apresentar diferentes propriedades físicas. Obviamente, as propriedades químicas de um composto no estado cristalino também podem ser diferentes devido a modificações estruturais. Neste trabalho, serão apresentadas várias estruturas de AZM no estado cristalino, incluindo dois complexos de coordenação baseados em AZM e cobre (II), e seus espectros vibracionais. Alguns espectros vibracionais experimentais serão comparados com espectros calculados via teoria do funcional da densidade (do inglês: density functional theory-DFT). Por fim, destacaremos a importância de estudos de natureza estrutural e vibracional para vários campos científicos, tais como farmacêutico, engenharia de cristal orgânicos, ciência de materiais cristalinos orgânicos, ciência de cristais orgânicos biológicos, dentre outros.