

RELAÇÕES ENTRE ESTRUTURA E ATIVIDADE DE PARABENOS – SUGESTÃO DE AULA PRÁTICA

Giovanna Savino (IC)¹, Karina de Aquino Fuzetti (IC)¹, Helena Braga Leites (IC)¹, Maria Eliza Cianciulli (IC)², Michelle Fidelis Corrêa (IC)³, Márcio Ferrarini (PQ)³, João Paulo dos Santos Fernandes (PQ)^{1*}.

*joao.fernandes@mackenzie.br

¹Centro de Ciências Biológicas e da Saúde, Universidade Presbiteriana Mackenzie, R. Consolação, 930 – Ed. Amantino Vassão – 01302-907 – Consolação – São Paulo-SP. ²Universidade do Grande ABC, Av. Industrial, 3330 – 09080-501 – Campestre – Santo André-SP. ³Centro Universitário São Camilo, Av. Nazaré, 1501 – 04263-100 – Ipiranga – São Paulo-SP.

Palavras Chave: parabenos, síntese de fármacos, REA, aula prática.

Introdução

Parabenos são os conservantes mais empregados em preparações farmacêuticas. São considerados conservantes adequados pela suas características (amplo espectro de ação, boa solubilidade em água, e são incolores, inodoros e insípidos). Entretanto, são alergênicos e possuem atividade estrogênica [1].

O objetivo deste trabalho é propor uma aula de Química Farmacêutica que possibilite o ensino do conceito de relações entre estrutura e atividade (REA), bem como sua determinação prática.

Resultados e Discussão

Os compostos foram sintetizados partindo-se do ácido 4-hidroxibenzóico ou de parabenos comercialmente disponíveis (metil e propilparabeno. A obtenção dos compostos de interesse foi verificada através do ponto de fusão e comparação com a literatura [2].

A atividade antimicrobiana foi realizada através da técnica de macrodiluição em tubos [2], utilizando soluções etanólicas dos compostos (de 25 a 100 mg/mL), e as cepas *S. aureus* ATCC 25923 e *E. coli* ATCC 25922. A concentração inibitória mínima (CIM) foi obtida como a menor concentração capaz de inibir o crescimento bacteriano.

Tabela 1. Valores de CIM obtidos.

Parabeno	CIM <i>S. aureus</i> (mM)	CIM <i>E. coli</i> (mM)
Metilparabeno		
Etilparabeno	15,18	13,34
Propilparabeno	4,75	4,75
Isopropilparabeno	4,38	4,38
o	4,38	4,38
Isoamilparabeno	3,79	3,79
Acetilmetilparabeno	19,20	19,20
Alilmetilparabeno	16,02	> 20,0

Pode-se verificar que o aumento da cadeia lateral do parabeno aumenta a atividade antimicrobiana, mas reduz a solubilidade em água, o que limita a aplicação como conservante. Além disso, a hidroxila é essencial para a atividade, pertencendo ao provável grupo farmacofórico. Sugere-se também relacionar a atividade com o logP dos compostos.

Conclusões

Conclui-se que o procedimento realizado é viável para aplicação em aulas de graduação, para introduzir os conceitos de determinação das REA, além de utilizar também técnicas de síntese orgânica e microbiologia, importantes na Química Farmacêutica.

Agradecimentos

Ao MackPesquisa pelo fomento de parte deste trabalho.

¹ Soni, M. G. et al. *Food Chem. Toxicol.* **2001**, 39, 513.

² Fernandes, J. P. S. et al. *Quím. Nova* **2013** (prelo).