Molécula do Ciprofloxacino

Autor(res)

Célia Regina Martinez Fortunato
Alcione Antunes Barbosa De Souza
Thays Fortes Costa
Maria Cristina De Oliveira
Natasha Godoi Simas
Isabelle Peixoto Diske Januário
Matheus Costa Silva

Categoria do Trabalho

Trabalho Acadêmico

Instituição

CENTRO UNIVERSITÁRIO ANHANGUERA DE SÃO PAULO

Resumo

Introdução: O ciprofloxacino pertence ao grupo das fluoroquinolonas, substâncias que bloqueiam determinadas enzimas de bactérias que têm um papel fundamental no metabolismo e na reprodução bacteriana, matando as bactérias causadoras da doença. Metologia Para esse trabalho tivemos como método de pesquisa os bancos de dados da Molinspiration, SwissAdme e o site SanarMed Desenvolvimento: Seguindo as regras e características de Lipkins, sua estrutura molecular é aceitadora e doadora de ligações de hidrogênio, devido seu LogP, TPSA, MM. Ligante GPCR 0,12; Modulador de canal iônico - 0,04; Inibidor de quinase -0,07; Ligante de receptor nuclear 0,19; Inibidor de protease -0,20; Inibidor de enzima 0,28; miLogP -0,70; TPSA 74,57; Átomos 24; MW 331,35; nON 6; nOHNH 2; nviolações 0;
nrotb 3; Volume 285,46. Conclusão: A ciprofloxacina não tem nenhuma violação com relação a estrutura de outro medicamento. É uma molécula com boa flexibilidade e a biodisponibilidade oral.

Referências:
http://www.swissadme.ch/
https://www.molinspiration.com/
https://sanarmed.com/resumo-ciprofloxacino-ligas/