

LIVRO DE RESUMOS

SIFSC

DÉCIMA SEMANA INTEGRADA DA
GRADUAÇÃO E PÓS-GRADUAÇÃO
DO INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO
CARLOS - USP



2020

Física e
Molecular

Universidade de São Paulo Instituto de Física de São Carlos

X Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

Livro de Resumos

São Carlos
2020

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos

SIFSC 10

Coordenadores

Prof. Dr. Vanderlei Salvador Bagnato

Diretor do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Prof. Dr. Luiz Vitor de Souza Filho

Presidente da Comissão de Pós Graduação do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Prof. Dr. Luís Gustavo Marcassa

Presidente da Comissão de Graduação do Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo

Comissão Organizadora

Arthur Deponte Zutião

Artur Barbedo

Beatriz Kimie de Souza Ito

Felipe de Souza Macias

Gabriel dos Reis Trindade

Gabriel Henrique Armando Jorge

Giovanna Costa Villefort

Giulia Kassab

Humberto Ribeiro de Souza

João Hiroyuki de Melo Inagaki

Juliana Naomi Yamauti Costa

Letícia Cerqueira Vasconcelos

Nickolas Pietro Donato Cerioni

Paulina Rossi Ferreira

Roberto Hiroshi Matos Furuta

Vinícius Pereira Pinto

Normalização e revisão – SBI/IFSC

Ana Mara Marques da Cunha Prado

Maria Cristina Cavarette Dziabas

Maria Neusa de Aguiar Azevedo

Sabrina di Salvo Mastrantonio

Ficha catalográfica elaborada pelo Serviço de Informação do IFSC

Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos
(10: 03-05 nov.: 2020: São Carlos, SP.)

Livro de resumos da X Semana Integrada do Instituto de Física de São Carlos/ Organizado por Joao H. Melo Inagaki [et al.]. São Carlos: IFSC, 2020.

321p.

Texto em português.

1.Física. I. Inagaki, Joao H. de Melo, org. II.Titulo.

ISBN: 978-65-993449-0-9

CDD 530

PG116

Molecular dynamic simulations of drug interactions with membrane models

ZAPATA, J. C. B. ; OLIVEIRA JUNIOR, O. N. ; MOURA, A. F. D.

juan.burbano@ifsc.usp.br

Levofloxacin is a broad spectrum antibiotic used to fight infections in the respiratory system, whose action in topical administrations (via inhalation) depends on molecular-level interactions with the alveolar membrane. In this work, we performed a molecular dynamics (MD) simulation to analyze the behavior of levofloxacin with a Langmuir-monolayer model using hydrated dipalmitoyl phosphocholine (DPPC) lipid as the main component of lung surfactant. The zwitterionic levofloxacin (1) (with stable form in the pH range of 6.0-7.5) was calibrated in the coarse-grained (CG) Martini force field (2) to reproduce free energies of solvation and the partition coefficient at the water-octanol interface. The CG bonded parameters were adjusted and compared with atomistic simulations to optimize the topology. The interaction of levofloxacin (2% w/w) with a 512-DPPC CG monolayer shows an increase in pressure for the phase transition in surface pressure-area isotherms, which is also observed experimentally. (3) The location of Levofloxacin induces a dipolar rearrangement of the phospholipid DPPC headgroup, favoring aggregation after the phase transition and drastically reducing its diffusion. These findings provide insights into efficient ways for topical medication with this drug.

Referências:

1 LAMBERT, A.; REGNOUF-DE-VAINS, J.-B.; RUIZ-LÓPEZ, M. Structure of levofloxacin in hydrophilic and hydrophobic media: Relationship to its antibacterial properties. **Chemical Physics Letters** , v. 442, n. 4-6, p. 281-284, July 2007. 2 MARRINK, S. J. *et al.* The MARTINI force field: coarse grained model for biomolecular simulations. **Journal of Physics Chemistry B** , v. 111, n. 27, p. 7812-7824, July 2007. 3 ORTIZ-COLLAZOS, S. *et al.* Interaction of levofloxacin with lung surfactant at the air-water interface. **Colloids and Surfaces B** , v. 158, p. 689-696, Oct. 2017.