

ESTUDO DA INTEGRIDADE DO ESTRATO CÓRNEO SOB ATUAÇÃO DE UM PROMOTOR DE PERMEÇÃO VIA SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL

Ana Célia Santos Fernandes¹

Mayara L. C. Ribeiro²

Bruna G. Carvalho³

Laurita dos Santos⁴

Priscila Pereira Fávero⁵

Resumo: O estrato córneo é a camada mais externa da pele, atua como uma forte barreira contra microrganismos, desidratação da pele e permeação de fármacos. Deste modo, para que haja um aumento de permeação, muitas vezes, faz-se necessária a utilização de promotores. Eles facilitam a interação por meio de mecanismos que diminuem a obstinação cutânea. Este trabalho utilizará a simulação computacional para prever mecanismos do promotor propilenoglicol na permeação dérmica. O objetivo avaliar se existe um aumento no transporte de ativos com menor danos a bicamada lipídica da pele. Para isso foi aplicado o pacote GROMACS, com cálculos baseados na dinâmica molecular. Foi possível analisar a integridade da barreira lipídica sob atuação do propilenoglicol em diferentes concentrações. Analisamos a maior eficácia quanto a permeação e os mecanismos envolvidos para este fim.

Palavras-chave: Promotor químico; Facilitadores; Permeação dérmica; Propilenoglicol; Simulação.

¹ Instituto de Pesquisa e Desenvolvimento/Universidade do Vale do Paraíba, Brasil. E-mail: anasf.eng.quimica@gmail.com.

² Instituto de Pesquisa e Desenvolvimento/Universidade do Vale do Paraíba, Brasil. E-mail: mayara.ribeiro0026@gmail.com.

³ Instituto de Pesquisa e Desenvolvimento/Universidade do Vale do Paraíba, Brasil. E-mail: gregatti.bruna@gmail.com.

⁴ Instituto de Pesquisa e Desenvolvimento/Universidade do Vale do Paraíba, Brasil. E-mail: lauritas9@gmail.com.

⁵ Instituto de Pesquisa e Desenvolvimento/Universidade do Vale do Paraíba, Brasil. E-mail: favero@univap.br.