ANÁLISE DAS PROPRIEDADES FÍSICO-QUÍMICAS DE COMPOSTOS TERPÊNICOS ORIUNDOS DA REGIÃO AMAZÔNICA

Lucas Emanuel Aquino Tavares¹; Marta Pinto de Castro¹; Amélia Carolina Glória Panhu da Silva¹; Kelton Pereira da Silva¹; Gabriela Bianchi dos Santos²

¹ Discentes do Instituto de Saúde Coletiva (ISCO) - Universidade Federal do Oeste do Pará ; ² Docente do Instituto de Saúde Coletiva (ISCO) - Universidade Federal do Oeste do Pará.

Email do Autor Principal: laquinotavares@gmail.com

Resumo

Terpenos são metabólitos secundários derivados de isopreno (C₅). Atualmente possuem a maior variedade estrutural com mais 35 mil estruturas já identificadas. A Amazônia possui uma grande biodiversidade com alto potencial para a descoberta de novas moléculas bioativas que podem dar origem a novos fármacos. Entretanto, muitos compostos apesar de possuírem propriedades terapêuticas relevantes, necessitam de propriedades físico-químicas adequadas para absorção, principalmente, considerando a via oral de administração. Diante disso, há a necessidade de estudos *in silico* para avaliar o comportamento farmacocinético das moléculas e sua biodisponibilidade oral. Diante disso, o objetivo desse trabalho foi analisar as propriedades físico-químicas de compostos terpênicos oriundos da região amazônica. Foram coletados, na plataforma NUBBE, 136 compostos terpênicos oriundos dos estados da Região amazônica, adquirindo seus códigos Smiles. Utilizou-se plataforma SwissADME para adquirir suas propriedades físico-químicas como peso molecular (PM), fração carbonos sp³, ligações rotacionáveis (NRB), número de grupos aceptores de ligação de hidrogênio (HBA), número de grupos doadores de ligação de hidrogênio (HBD), área de superfície polar (TPSA) e logP. Os dados foram organizados em planilhas de Excel para cálculos de dos percentis 70°, 80° e 90°. Como resultado, os percentis dos parâmetros avaliados, 70% dos compostos apresentaram PM ≤ 444,32, logP ≤ 4,34 HBA ≤ 6, HBD ≤ 1, TPSA ≤ 71,06, fração de carbono sp³ ≤ 0,87 e NRB ≤ 5. 80 % apresentaram PM ≤ 470,51, LogP ≤ 4,73, HBA ≤ 8, HBD ≤ 2, TPSA ≤ 114,69, fração de carbono sp³ ≤ 0,90 e NRB ≤ 5,2. 90 % apresentaram PM ≤ 506,45, LogP ≤ 5,05, HBA ≤ 11, HBD ≤ 4, TPSA ≤ 163,41, fração de carbono sp³ ≤ 0,93 e NRB ≤ 5,05. Estudos realizados por Lipinski, et al (1997) afirmam que para um fármaco apresentar uma boa biodisponibilidade oral, este deverá possuir LogP menor que 5, peso molecular até 500 Da, número de grupos aceptores de ligação de hidrogênio precisam ser menores que 10 e grupos doadores de ligação de hidrogênio menores que 5. Conforme Veber et al (2002), para que uma molécula tenha uma boa disponibilidade oral, a Área de superfície polar topológica precisa ser ≤ 140 Å², o Número de ligações rotacionáveis precisa ser ≤ 10 e para Lovering et al (2009) a fração de carbono sp³ precisa estar acima de 0,47. Constatou-se que a maioria dos compostos não obedeceu aos parâmetros propostos por Linpinski, e Veber, mas os percentis NRB mostraram-se estar dentro do parâmetro proposto por Lovering. Sendo assim, não apresentam-se com boa biodisponibilidade oral, mas podem ser submetidos à estratégias

de química medicinal para aprimoramento das suas propriedades físico-químicas, e consequentemente, maior probabilidade de absorção oral.

Palavras-chave: Terpenos, Bioativos da Amazônia, Propriedades físico-químicas, Química Medicinal