

Propriedades físico-químicas de Terpenos isolados de plantas da Flora Brasileira e suas perspectivas farmacocinéticas

Lúcia da Silva Cordeiro¹; Elén Juliane da Silva²; Gabriela Bianchi dos Santos³

1 – Autor principal, Graduanda em Farmácia, Universidade Federal do Oeste do Pará, Santarém – PA, e-mail: luciascfarm@gmail.com

2 – Coautor 1, Graduanda em Farmácia, Universidade Federal do Oeste do Pará, Santarém – PA, e-mail: elenjuliane23@gmail.com

3 – Coautor 2, Docente do Instituto de Saúde Coletiva, Universidade Federal do Oeste do Pará, Santarém – PA, e-mail: gabriela.bds@ufopa.edu.br

O processo de biossíntese dos terpenos resulta em uma gama de estruturas variáveis que podem apresentar propriedades biológicas de interesse farmacológico. Estudos que visam avaliar a biodisponibilidade oral de novos candidatos a fármacos se mostram relevantes e possibilitam o emprego de descritores moleculares para compreensão de aspectos farmacocinéticos como a absorção. O presente trabalho tem por objetivo avaliar as propriedades físico-químicas de terpenos da flora brasileira com vistas em parâmetros de biodisponibilidade oral como: Peso Molecular (PM), Grupos Doadores de ligação de Hidrogênio (GDH), Grupos Aceptores de ligação de Hidrogênio (GAH) Lipofilicidade (LogP), Área de Superfície Polar Topológica (TPSA), Número de Ligações Rotativas (NRB) e Fração de Carbono sp^3 (FC sp^3). Foi realizada busca na plataforma de acesso livre NuBBE Database onde aplicaram-se os filtros “Terpenes”, “Brasil” e “isolated from a plant” dos campos “General Information”, “Species Location” e “Source” (respectivamente). Para cálculo das propriedades físico-químicas utilizou-se o código SMILES de cada molécula na plataforma SwissADME. As estruturas com PM muito elevado e/ou que a plataforma não expressou LogP de consenso e FC sp^3 não foram selecionadas. Os dados foram compilados em planilha no Excel para as correlações gráficas PM x LogP, FC sp^3 x NRB, GAH x GDH, TPSA x PM e cálculos de média, mediana e percentil 90. Obteve-se um total de 593 compostos terpenoides isolados de plantas da biodiversidade brasileira que foram analisados segundo os descritores moleculares de Lipinski e colaboradores (PM < 500, LogP entre -1 e 5, GDH \leq 5 e GAH \leq 10), Veber e colaboradores (TPSA \leq 140Å e NRB \leq 10) e Lovering e colaboradores (FC sp^3 \geq 0,47), da amostra em questão somente 584 moléculas estavam aptas à análise. A correlação LogP e PM demonstrou que a maioria dos compostos terpenoides se agrupam dentro dos valores estabelecidos e apresentam média e mediana adequadas, enquanto o percentil 90 para tais propriedades estava acima do definido; em correlação GDH e GAH as moléculas se encontram no espaço químico que atende aos limites; em FC sp^3 e NRB os resultados analisados estão de acordo com os descritores; em TPSA e PM 90% dos compostos ultrapassam valores ideais. De maneira geral, os terpenos isolados de plantas da flora brasileira reunidos na plataforma NuBBE Database, apresentam propriedades físico-químicas relativamente adequadas aos parâmetros de PM, LogP e TPSA visados, de maneira que os valores de NRB, FC sp^3 , GAH, GDH foram os mais satisfatórios.

Palavras-chave: Terpenos, Propriedades físico-químicas, Absorção, Biodisponibilidade, Via oral.