Trabalho sobre a Dexametasona e Regra dos 5 de Lipinski

Autor(res)

Célia Regina Martinez Fortunato
Eduardo Ribeiro Sousa
Anderson Nascimento Pinheiro
Jose Victor Da Silva Borges
Giovana Alves Araujo

Categoria do Trabalho

1

Instituição

CENTRO UNIVERSITÁRIO ANHANGUERA DE SÃO PAULO

Resumo

A dexametasona, também conhecido como, 9-fluoro-11,17-di-hidroxi-17-(2-hidroxiacetil)-10,13,16-trimetil-6,7,8,11,12,14,15,16-octahidrociclopenta[a]fenantren-3-ona, é uma substância farmacológica que pertence à classe dos corticosteroides possuindo uma notável atividade anti-inflamatória, imunossupressora e metabólica.
Realizando uma previsão in silico de propriedades farmacocinéticas baseando na regra dos cinco de lipinski, onde estabelece que uma molécula para ser um bom fármaco deve apresentar valores para 4 parâmetros múltiplos de 5: log P maior ou igual a 5, Massa Molecular menor ou igual a 500, aceitadores de ligação de Hidrogênio menor ou igual a 10 e doadores de ligação de hidrogênio menor ou igual a 5, Temos que a Dexametasona possui um logP de 2,26 o que é considerado ideal pois será um fármaco com uma lipofilicidade adequada e irá ter melhor absorção por ter uma ótima travessia atráves da membrana. A molécula possui um peso molecular de 392.46 g/mol ou Da, no qual é um ótimo peso para a molécula pois quanto menor a MM melhor a difusão no organismo, possui 2 ligações rotáveis e 6 átomos aceitadores de Hidrogênio no qual são adequados, fornecendo o átomo rico em elétrons para receber a ligação de hidrogênio e 3 átomos doadores de hidrôgenio sendo ideal também para ter as características de uma boa molécula.
Além disso, outras características a serem avaliadas que contribuem para que o fármaco seja ou não uma boa molécula são o LogS que, apesar de para atravessar a barreira tem que haver uma alta lipofilicidade, ela necessita que haja algumas características solúveis, sendo esse fármaco com características solúveis apropriadas. O TPSA da molécula é 94,83 Å² indicando uma boa permeabilidade da molécula na membrana plasmática celular pois quanto menor a TPSA maior a capacidade de permear. Referente a Farmacocinética, não possui nenhum inibidor que possa atrapalhar no seu desenvolvimento mediante ao organismo.
Portanto, podemos concluir que analisando os valores teóricos de Lipofilicidade, Peso molecular, Aceitadores e doadores de hidrogênio, Solubilidade, Área de superfície Polar topológica e Inibidores chegou-se à conclusão que o composto estudado tem grande potência em ser um fármaco, pois apresentaram os resultados conforme as regras de Lipinski caracteriza para uma molécula ser um bom fármaco e também valores positivos para drug-likeness e drug-score. O composto não apresentará problemas para serem administrados por via oral.

5ª SEMANA DE CONHECIMENTO