Trabalho sobre a Dexametasona e Regra dos 5 de Lipinski

Autor(res)

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

Categoria do Trabalho

Trabalho Acadêmico

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