

## Análise de propriedades físico químicas do ambroxol segundo Lipinski

### Autor(res)

Célia Regina Martinez Fortunato  
Joao Carlos Souza Ramos  
Nicolly De Arruda Oliveira  
Tabita Silva Lima  
Fabio Henrique Lima Barbosa

### Categoria do Trabalho

1

### Instituição

FACULDADE ANHANGUERA DE OSASCO

### Resumo

A molécula com um valor de LogP de 2,98 está inclinada à lipofilicidade, o que significa que tem afinidade por gordura. Isso a torna capaz de atravessar a barreira hematoencefálica e pode também inibir enzimas como a CYP2D6. A enzima CYP2D6 é uma proteína do citocromo P450 que desempenha um papel crucial no metabolismo de uma grande variedade de compostos. Ela está envolvida na biotransformação de substâncias químicas, tornando-as mais solúveis em água para que possam ser excretadas pelo corpo.

### Introdução

A molécula 4-[(2-amino-3,5-dibromofenil) metilamino] ciclohexan-1-ol cloridrato ou cloridrato de ambroxol constituem em um potencial de expectoração e ajuda na eliminação do catarro das vias respiratórias, alivia a tosse, desobstrui os brônquios e, devido ao leve efeito anestésico local, alivia a irritação da garganta associada à tosse com catarro.

Este trabalho consistiu no estudo in silico da molécula através de uma ferramenta online "SwissADME" para obter informações sobre seu peso molecular, "lipofilicidade", solubilidade em água e farmacocinética

### Metodologia e Resultados

Este trabalho utilizou a ferramenta online SwissADME para analisar a molécula do cloridrato de ambroxol, fornecendo informações sobre seu peso molecular, lipofilicidade, solubilidade em água, farmacocinética e similaridade com outras drogas.

### Discussão

A análise dos dados revelou que o cloridrato de ambroxol apresenta um peso molecular de 378,10g/mol e um LogP (lipofilicidade) de 2,98, características que sugerem sua capacidade de atravessar a membrana plasmática e torna possível sua absorção no trato gastrointestinal. Além disso, sua moderada afinidade pela lipofilicidade e solubilidade em água também indicam a capacidade de atravessar a barreira hematoencefálica. Ademais, a molécula exibe a capacidade de inibir a enzima CYP2D6, uma proteína do citocromo P450 com um papel essencial na metabolização de diversos compostos e medicamentos, podendo potencialmente resultar em níveis mais altos desses compostos no corpo e aumentando o risco de efeitos colaterais com sua inibição.

### Conclusão

Com base em tudo já apresentado, pode-se notar que a molécula possui bons índices para biodisponibilidade oral



e é adequadamente solúvel para ser metabolizada pelo organismo, mas também possui aspectos importantes que devem ser observados como a possibilidade de atravessar a barreira hematoencefálica e inibição da enzima CYP2D6, o que pode acarretar em problemas ocasionais.



# 5ª SEMANA DE CONHECIMENTO

