Análise de propriedades físico químicas do ambroxol segundo Lipinski

Autor(res)

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

Categoria do Trabalho

Trabalho Acadêmico

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.

Esse trabalho consistiu no estudo in sílico da molécula através de uma ferramenta online “SwissADME” para obter informações sobre seu peso molecular, “lipofilicidade”, solubilidade em água e farmacocinética

Metodologia e Resultados

Esse 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

5ª SEMANA DE CONHECIMENTO

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