Aplicação de Modelagem Molecular e QSAR na Descoberta de Novos Fármacos

Autor(res)

Ramon Tiago Albuquerque Andrade
Raphael Farias Da Silveira
Fernanda Farias De Medeiros
Weslei Alves De Araújo

Categoria do Trabalho

Trabalho Acadêmico

Instituição

FACULDADE ANHANGUERA

Resumo

A modelagem molecular e os modelos de relação quantitativa entre estrutura e atividade (QSAR) têm se destacado como ferramentas estratégicas no desenvolvimento de novos fármacos, possibilitando análises in silico que reduzem custos, tempo e o uso de animais em testes laboratoriais. Estas tecnologias, reconhecidas por órgãos reguladores como a ANVISA, promovem uma triagem mais precisa de compostos com potencial farmacológico, contribuindo para a segurança e eficácia dos medicamentos. Este trabalho tem como objetivo demonstrar, por meio de revisão narrativa, a aplicabilidade dessas abordagens com base em documentos regulatórios e estudos científicos atuais. A metodologia foi fundamentada em cinco fontes principais, incluindo publicações da ANVISA, um relatório técnico da ALTOX, um estudo nacional sobre doenças negligenciadas e diretrizes do Ministério da Ciência, Tecnologia e Inovação (MCTI). Os resultados indicam que os modelos computacionais, como o OECD QSAR Toolbox, Toxtree e ADMET Predictor, são eficazes na previsão de propriedades toxicológicas e farmacocinéticas, além de serem aceitos como métodos alternativos válidos nas submissões regulatórias. A aplicação prática desses métodos está evidenciada na avaliação de impurezas genotóxicas e na seleção de candidatos a fármacos para doenças tropicais negligenciadas. Conclui-se que as ferramentas in silico representam uma evolução nos processos regulatórios e de pesquisa, promovendo inovação, ética e eficiência no setor farmacêutico.