



AVALIAÇÃO IN SILICO DE HÍBRIDOS BENZILPIPERAZINA-RODANINA PARA O DESENVOLVIMENTO DE NOVOS FÁRMACOS PSICOATIVOS

Maria Eduarda Signorini Pereira, Fátima de Campos Buzzi.

Engenharias e Ciências Agrárias, Exatas e da Terra
Química - Química Orgânica

A pesquisa teve como base a descoberta de novos fármacos psicoativos, utilizando os fragmentos benzilpiperazina, um estimulante do SNC e rodanina, um composto orgânico heterocíclico contendo nitrogênio e enxofre. Compostos heterocíclicos têm sido considerados muito promissores e encontram-se em vários fármacos psicoativos utilizados na terapêutica como a Buspirona, que foi usada como protótipo. Este trabalho buscou unir estes dois fragmentos ativos a fim de desenvolver fármacos psicoativos através da avaliação *in-silico*. Realizou-se a revisão de artigos e conteúdos relacionados aos fragmentos e avaliação *in-silico* de fármacos. Foi utilizado o website SwissADME (<http://swissadme.ch>), onde estudou-se as propriedades físico-químicas da Rodanina, Benzilpiperazina e o protótipo usado (Buspirona), usou-se também o aplicativo ACD/ChemSketch, no qual foram construídas e otimizadas as estruturas moleculares da série A e B. As séries (A e B) foram planejadas com 5 moléculas cada, utilizando os substituintes de Topliss, unindo os fragmentos benzilpiperazina e rodanina em ambas e mantendo-se o mesmo número de espaçadores entre os anéis heterocíclicos com base no protótipo da Buspirona. Avaliou-se o radar de biodisponibilidade para analisar as propriedades físico-químicas de cada molécula, a fim de identificar as moléculas mais promissoras *in silico* para prosseguir no estudo. A partir da análise das moléculas observou-se que o tamanho das moléculas variou entre 363,54 e 520,54 g/mol, a lipofilicidade entre 2,22 e 5,29 e a insolubilidade apresentou valores menores que -8,0, nestes parâmetros apenas uma molécula ficou fora dos limites definidos pelo radar. A polaridade variou entre 84,18 e 93,41 Å², a flexibilidade entre 7 a 9 e fração de carbonos hibridizados em sp³ variou de 0,36 a 0,58. No radar de biodisponibilidade todas as moléculas mantiveram-se dentro da área rosa do radar o qual representa as condições excelentes para a biodisponibilidade para a administração dos fármacos por via oral. De acordo com o radar de biodisponibilidade, observou-se que as moléculas da série A apresentaram as melhores características dentro dos parâmetros estipulados, mostrando-se mais alinhadas e sendo selecionadas para prosseguir com as análises *in-silico*.

Palavras-chave: Benzilpiperazina. Rodanina. In sílico.

Programa UNIEDU - Bolsa de Pesquisa Art. 170 e Art. 171 / Governo de Santa Catarina / UNIVALI