

PREVISÃO *IN SILICO* ADMET DE COMPOSTOS QUÍMICOS COM POTENCIAL ANTITUMORAL

Jefferson Alberto Menezes Rodrigues¹
Verônica de Fátima Pimenta Garcia²
Vera Lucia Maciel-Silva³
Maria de Jesus Câmara Mineiro⁴
Pâmela Rayssa Almeida Ferraz⁵
Israel Higino de Sousa⁶

RESUMO

Os complexos de rutênio vêm ganhando destaque ao se mostrarem promissores a novos fármacos, ao apresentarem propriedades antitumorais e possuírem novas alternativas quimioterápicas para o tratamento do câncer. O presente estudo tem como objetivo avaliar as previsões *in silico* de candidatos a fármacos antitumorais como Rutênio conjugados com prolina e Rutênio conjugados com treonina, frente a fármacos já existentes como, Altretamina, Mecloretamina, Carmustina e Lomustina. Foi utilizada a plataforma OSIRIS Property Explorer® para determinar o efeito toxicológico dos candidatos a fármacos. Os parâmetros de ADMET foram medidos usando a ferramenta SwissADME® e ADMETlab. Dessa forma, nossos resultados revelaram que todos os candidatos conseguem ter absorção, só que em níveis diferentes. a Altretamina, Carmustina e Lomustina possuem uma alta capacidade de serem absorvidos, já a Mecloretamina tem uma baixa absorção. Além disso, os fármacos Altretamina e Mecloretamina não apresentam penetração na barreira hematoencefálica, diferente da Carmustina e a lomustina que apresentaram uma boa penetração. Quanto à avaliação de metabolização da inibição das enzimas tanto para o CPY3A4, como para o CYP2D6 ambos não apontaram ser inibidor e nem substrato para os fármacos já existentes. Foi possível observar que estes fármacos possuem altos níveis toxicológicos. Nossos resultados também mostraram que os complexos de rutênio acoplados aos aminoácidos prolina (RuPro) e treonina (RuThr) com 2 cloros analisados apresentam alta probabilidade de serem absorvidos passivamente pelo intestino, apresenta para o complexo de (RuThr) com 4 ligações do ametal. Foi observado que somente o complexo de RuPro com 4 cloros apresenta alta capacidade de ultrapassar a barreira hematoencefálica, além de serem solúveis em água.

Palavras-chave: *in silico*, Ferramentas Computacionais, Fármacos, Câncer.

¹ Graduando do Curso de Ciências Biológicas da Universidade Estadual do Maranhão (UEMA) - Campus Pinheiro, jeffersonmenezes2002@gmail.com;

² Graduanda pelo Curso de Ciências Biológicas da Universidade Estadual do Maranhão (UEMA) - Campus Pinheiro, veronicafatimapimentagarcia@gmail.com

³ professora do departamento de Ciências biológicas do Campus paulo VI. (UEMA) - são luís, veramaciel11@hatmail.com;

⁴ Diretora do Curso de Ciências Biológicas do Campus Pinheiro. (UEMA) - Pinheiro, dijecm@gmail.com;

⁵ Graduanda pelo Curso de Ciências Biológicas da Universidade Estadual do Maranhão (UEMA) - Campus Pinheiro, pamelaferraz380@gmail.com;

⁶ Professor do departamento de biologia da UEMA- campus pinheiro, Doutor em biotecnologia pela Universidade Federal do Maranhão - (UFMA), israelhigino@hotmail.com.

