



ANÁLISE IN SILICO E EXPERIMENTAL DOS PARÂMETROS FÍSICO-QUÍMICOS E FARMACOCINÉTICOS DA DONEPEZILA

Ingrid Raquel Silva¹, Paulo Fernando da Silva Santos²

1 Graduada em Farmácia, Universidade Federal de Campina Grande (UFCG)-Campus CES.

2 Doutor em Química Orgânica, subárea Química Biológica e Medicinal; UABQ, PPGCNBIOTEC, UFCG- Campus CES.

Autor correspondente: iingridraquell@gmail.com, Paulo.fernando@professor.ufcg.edu.

Introdução: A donepezila é um fármaco amplamente utilizado no tratamento da Doença de Alzheimer, atuando como inibidor reversível da acetilcolinesterase. A caracterização de suas propriedades físico-químicas e farmacocinéticas é essencial para a compreensão de seu perfil terapêutico. **Objetivos:** Comparar os parâmetros in silico obtidos pela plataforma SwissADME com os dados experimentais reportados na literatura científica. **Método:** Foi realizada a análise da estrutura da donepezila na ferramenta SwissADME, com obtenção de parâmetros como massa molecular, lipofilicidade, área de superfície polar topológica (TPSA), solubilidade, permeabilidade gastrointestinal e capacidade de atravessar a barreira hematoencefálica. Esses dados foram comparados com valores experimentais disponíveis em artigos científicos e monografias oficiais. **Resultados:** A donepezila apresentou massa molecular de 379,49 g/mol, TPSA de 38,77 Å² e logP de consenso de aproximadamente 4,00, indicando caráter lipofílico moderado. As predições in silico indicaram alta absorção gastrointestinal e potencial permeabilidade à barreira hematoencefálica, em concordância com dados clínicos que demonstram elevada biodisponibilidade oral e ação central. Foram observadas limitações do modelo in silico quanto à estimativa de parâmetros como meia-vida, volume de distribuição e clearance, que são obtidos por estudos clínicos. **Conclusão:** O SwissADME mostrou-se útil para a predição inicial das propriedades da donepezila, apresentando boa concordância qualitativa com os dados experimentais, embora não substitua estudos farmacocinéticos in vivo. O uso combinado de ferramentas computacionais e dados experimentais é essencial para a caracterização segura de fármacos.

Palavras-chave: donepezila; SwissADME; farmacocinética.

