



AVALIAÇÃO FARMACOCINÉTICA E TOXICOLOGIA DE UMA MOLÉCULA CANDIDATA E COMPARAÇÃO COM O PERFIL DO BENZNIDAZOL

José Emerson Pereira dos Santos¹, Ana Luísa Ferreira Ramos Justino², Paulo Fernando da Silva Santos Júnior³.

1 Graduando em Licenciatura em Química, Universidade Federal de Campina Grande (UFCG)- Campus CES.

2 Graduanda em Licenciatura em Química, Universidade Federal de Campina Grande (UFCG)- Campus CES.

3 Docente de Química, Universidade Federal de Campina Grande (UFCG)- Campus CES.

Autor correspondente: jose.emerson@estudante.ufcg.edu.br

Introdução: A avaliação de propriedades farmacocinéticas é essencial para a seleção e otimização de candidatos a fármacos, especialmente quando envolve compostos nitro-heterocíclicos, como o benznidazol. Neste estudo, foi analisado o perfil ADME/Tox de uma molécula proposta, contendo um grupo nitro e características estruturais compatíveis com uso oral. As predições indicaram solubilidade aquosa moderada, lipofilicidade baixa ($\text{LogP} \approx 1,1$) e boa absorção intestinal prevista ($\sim 76\%$), sugerindo potencial adequado para administração oral. Além disso, a permeabilidade moderada em modelo Caco-2 e o cumprimento das regras de Lipinski reforçam o perfil favorável à biodisponibilidade. A molécula foi identificada como substrato da glicoproteína-P, indicando possibilidade de efluxo intestinal e baixa penetração no sistema nervoso central, o que não compromete aplicações terapêuticas sistêmicas. A comparação com benznidazol mostrou semelhanças importantes, como massa molecular reduzida e presença do grupo nitro, porém com vantagens relativas em solubilidade e previsibilidade de absorção. Apesar do perfil biofarmacêutico promissor, a presença do grupamento nitro demanda atenção, devido ao potencial risco genotóxico descrito para nitro-heterocíclicos. Assim, ensaios experimentais, avaliação hepatocelular e estudos de metabolismo, são recomendados para confirmar a segurança e o potencial terapêutico do composto. Os resultados sugerem que a molécula analisada apresenta características relevantes para continuidade em etapas posteriores de desenvolvimento, desde que aliada a uma investigação toxicológica aprofundada.

Palavras-chave: ADME; benznidazol; farmacocinética; toxicidade; nitro-heterocíclicos.

