

AVALIAÇÃO COMPUTACIONAL DAS PROPRIEDADES FÍSICO-QUÍMICAS DE CANDIDATOS A FÁRMACOS ANTIVIRAIS

DIAS, G. S.¹, SILVA, R. S.², CAMARGO, L. S.³, NOGARA, P. A.⁴

¹ Instituto Federal Sul-Rio-Grandense (IFSUL) – Bagé – RS – Brasil –
gabrieldias.bg023@academico.ifsul.edu.br

² Instituto Federal Sul-Rio-Grandense (IFSUL) – Bagé – RS – Brasil –
rafaelsilva.bg007@academico.ifsul.edu.br

³ Instituto Federal Sul-Rio-Grandense (IFSUL) – Bagé – RS – Brasil – leandrocamargo@ifsul.edu.br

⁴ Instituto Federal Sul-Rio-Grandense (IFSUL) – Bagé – RS – Brasil – pablonogara@ifsul.edu.br

RESUMO

Este estudo apresenta uma análise *in silico* das propriedades farmacológicas de dois novos candidatos a antivirais: a molécula $C_{16}H_{29}N_5O_4S_2$ e a molécula $C_{15}H_{27}N_5O_4S_2$. O objetivo central foi verificar se esses compostos atendem aos critérios de *drug-likeness* necessários para o desenvolvimento de medicamentos. Foram utilizadas as plataformas SwissADME, ProTox 3.0 e pkCSM para a coleta de dados de absorção, distribuição, metabolismo, excreção e toxicidade (ADMET). Os resultados indicam que ambas as moléculas possuem baixo potencial de toxicidade e cumprem os requisitos fundamentais da Regra de Lipinski. As análises revelam que as estruturas são seguras para o avanço em pesquisas biotecnológicas, apresentando perfis favoráveis de estabilidade e baixa letalidade aguda.

Palavras-chave: Bioinformática, Propriedades farmacológicas, ADMET, *in silico*.

1 INTRODUÇÃO

A utilização de métodos computacionais para a análise de estruturas moleculares representa um avanço significativo na convergência entre a informática e as ciências biológicas. Por meio da representação de dados via notação SMILES (*Simplified Molecular Input Line Entry System*), é possível realizar triagens virtuais precisas para predeterminar o perfil de novas substâncias. No desenvolvimento de novos fármacos, essa abordagem permite identificar compostos com potencial terapêutico e baixo risco biológico antes da realização de testes em laboratórios físicos, reduzindo assim custos e tempo. Esta abordagem alinha-se ao ODS 3 (Saúde e Bem-Estar) da ONU ao acelerar a descoberta de medicamentos seguros e eficazes. Além disso, a prática *in silico* promove a sustentabilidade ao reduzir o consumo de reagentes químicos em fases pré-clínicas. O

objetivo do trabalho foi verificar se moléculas orgânicas possuem características adequadas para o desenvolvimento de medicamentos antivirais.

2 METODOLOGIA

A investigação das estruturas foi conduzida por meio de triagens virtuais processadas em servidores especializados, como SwissADME, ProTox 3.0 e pkCSM, utilizando a notação SMILES. A viabilidade farmacológica foi determinada confrontando os dados obtidos com os limites estabelecidos pela Regra de Lipinski e pelos parâmetros de Veber. Foram observados critérios como massa molar (≤ 500 g/mol), lipofilicidade ($\log P \leq 5$), além da contagem de doadores (≤ 5) e aceptadores (≤ 10) de interações de ligação de hidrogênio. Adicionalmente, avaliou-se a flexibilidade molecular e a área de superfície polar (TPSA), seguindo as diretrizes de conformidade farmacológica.

3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

As moléculas analisadas apresentaram características que as diferenciam de outras previamente testadas. Elas demonstraram conformidade com os critérios de desenvolvimento de fármacos, possuindo características físico-químicas e farmacológicas semelhantes às de medicamentos aprovados e comercializados (Tabela 1)

A análise de toxicidade (Tabela 2) sugere que nenhuma das variantes apresenta potencial mutagênico ou danos ao fígado (hepatotoxicidade), o que é determinante para a segurança biológica. Ambas as estruturas foram classificadas na Classe 5 de toxicidade, apresentando uma dose letal aguda (LD_{50}) de 5000 mg/kg, indicando um perfil de segurança elevado, com baixo risco de efeitos adversos severos em doses convencionais. A variação de um carbono na cadeia (C16 vs C15) não alterou significativamente o comportamento de segurança das moléculas, mantendo a integridade do núcleo molecular para futuras aplicações e derivatização.

Tabela 1 – Perfil físico-químico das estruturas analisadas

Indicador Analisado	$C_{16}H_{29}N_5O_4S_2$	$C_{15}H_{27}N_5O_4S_2$	Limite de Referência	Verificação

Peso Molecular (g/mol)	466,46	452,43	≤ 500	Conforme
Log Po/w (Consenso)	-0,96	-1,24	≤ 5	Conforme
Doadores de H	5	5	≤ 5	Conforme
Aceitadores de H	6	6	≤ 10	Conforme
Ligações Rotacionáveis	13	12	≤ 10	Não Conforme
TPSA ($\text{\AA}^2$)	181,71	181,71	≤ 140	Não Conforme

Fonte: próprio autor.

Tabela 2 – Perfil de segurança (toxicidade) das estruturas analisadas

Teste de Toxicidade	$\text{C}_{16}\text{H}_{29}\text{N}_5\text{O}_4\text{S}_2$	$\text{C}_{15}\text{H}_{27}\text{N}_5\text{O}_4\text{S}_2$	Limite de Referência	Verificação
Toxicidade AMES	Negativo	Negativo	Negativo	Ausência de mutagenicidade
Hepatotoxicidade	Não	Não	Não	Ausência de danos ao fígado
ProTox 3.0's LD_{50} (mg/kg)	5000	5000	≥ 2000	Toxicidade aguda baixa
Classe de Toxicidade	5	5	≥ 5	Categoria de segurança (ProTox)

Dose Máx. Tolerada	0,487	0,592	$\geq 0,479$	log mg/kg/dia
-----------------------	-------	-------	--------------	---------------

Fonte: próprio autor.

4 CONCLUSÃO

Os testes realizados por simulações de química computacional demonstram que as moléculas $C_{16}H_{29}N_5O_4S_2$ e $C_{15}H_{27}N_5O_4S_2$ possuem um perfil de segurança promissor. Elas atendem aos requisitos técnicos de massa molar, solubilidade, flexibilidade e polaridade característicos de fármacos, e não apresentam previsão de riscos graves de toxicidade. Portanto, os dados justificam o avanço desta pesquisa para etapas de testes laboratoriais, visando confirmar o potencial terapêutico dessas substâncias contra patologias específicas.

5 REFERÊNCIAS

NAÇÕES UNIDAS BRASIL. **Objetivos de Desenvolvimento Sustentável**. Brasília, [s. d.]. Disponível em: <https://brasil.un.org/pt-br/sdgs>. Acesso em: 27 mar. 2026.

SWISS INSTITUTE OF BIOINFORMATICS. **SwissADME**. [s. d.]. Disponível em: <https://www.swissadme.ch/>. Acesso em: 19 mar. 2026.

UNIVERSITÄTSMEDIZIN BERLIN. **ProTox-3.0**: prediction of toxicity of chemicals. Berlin, [s. d.]. Disponível em: https://tox.charite.de/protox3/index.php?site=compound_input. Acesso em: 19 mar. 2026.

UNIVERSITY OF QUEENSLAND. **pkCSM**: predicting pharmacokinetic properties using graph-based signatures, [s. d.]. Disponível em: <https://biosig.lab.uq.edu.au/pkcsm/prediction>. Acesso em: 19 mar. 2026.