

Prospecção farmacocinética do biflavonóide amentoflavona: Um estudo *in silico*

¹Leonardo Soares Freitas – UECE – leonardo.soares@aluno.uece.br

²Lucas Soares Frota – UECE – lucassfrota@gmail.com

³Daniela Ribeiro Alves – UECE - alves.danielaribeiro@gmail.com

⁴Vania Carla de Sousa – UECE – engenheiravania@gmail.com

⁵Emmanuel Sousa Marinho – UECE - emmanuel.marinho@uece.br

⁶Selene Maia de Moraes – UECE - selene.moraes@uece.br

PALAVRAS CHAVES. Fármacos, toxicidade, ADMET, amentoflavona.

DEFINIÇÃO. Os estudos farmacocinéticos acerca da biodisponibilidade e das interações do composto no corpo humano da amentoflavona, permitem construir modelos apropriados para interpretar a cinética dessa substância quando proposta como um fármaco, bem como avaliar a sua eficácia e toxicidade. A importância deste biflavonóide, deriva do seu vasto potencial biológico como anti-inflamatório, antimicrobiano, anticolinesterásico, etc. Desta forma será importante avaliar parâmetros físico-químicos relacionados a sua absorção no organismo. **OBJETIVO.** Analisar a farmacocinética da amentoflavona em relação ao seu potencial farmacológico. **METODOLOGIA.** As propriedades de absorção, distribuição, metabolismo, excreção e toxicidade (ADMET) foram calculadas usando o servidor pkCSM. **RESULTADOS.** Nos ensaios de predição, em relação a absorção, a amentoflavona é absorvida pela glicoproteína P, uma proteína importante que atua como barreira fisiológica das células, pois esta expulsa toxinas e xenobióticos para o exterior das células, mostrando que a amentoflavona, caracterizando o seu caráter benéfico às células. Possui também uma absorção de 84% no intestino, mostrando uma boa absorção e podendo ser indicada como fármaco via oral. Possui bons resultados de distribuição em permeabilidade na barreira hematoencefálica e permeabilidade no sistema nervoso central, com 1,653 e 3,2 respectivamente, com potencial terapêutico de doenças como mal de Alzheimer, mal de Parkinson, entre outras doenças do sistema nervoso central. A amentoflavona é metabolizada como substrato da CYP3A4, enzima muito importante nos mamíferos na metabolização de

fármacos, corroborando com o potencial da mesma. Possui um valor de liberação total pelo organismo de 0,484. A dose máxima tolerada é de 438 mg por dia, tornando-o de baixa toxicidade. Também é capaz de inibir o gene hERG II que auxilia na produção da proteína responsável por mediar os batimentos cardíacos, evidenciando que seu uso pode levar a problemas cardíacos. Porém, não apresentou toxicidades hepática e epitelial, o que pode direcionar possíveis utilizações. **CONCLUSÃO.** A amentoflavona tem características farmacocinéticas relevantes para o seu uso como medicamento, mesmo demonstrando alguns poucos pontos negativos, revela potencial para estudos mais aprofundados, visando sua futura utilização.