



PROTOTIPAGEM DE NOVOS FÁRMACOS ANTITUMORAIS POR HIBRIDIZAÇÃO MOLECULAR

Caroline Ferreira Dias¹
Antonia Felicity Vieira De Melo²
Alef Nahaman Da Silva Sales³
Jamerson Ferreira De Oliveira⁴

RESUMO

O câncer é uma das principais causas de mortalidade mundial, motivando a busca por novos protótipos com atividade antitumoral. Neste estudo, a TSC-09 foi escolhida como precursora por sua atividade citotóxica, e os tiazóis TZ-17 e TZ-18 por suas estruturas heterocíclicas com potencial de interação biológica com alvos de interesse. As sínteses foram conduzidas em condições otimizadas, incluindo refluxo controlado, ciclos de banho ultrassônico e ajustes de solventes, com monitoramento por cromatografia em camada delgada. Os compostos foram isolados e purificados, incluindo recristalização quando necessário, e a caracterização estrutural foi realizada por espectroscopia no infravermelho, confirmando a presença de grupos funcionais característicos de cada classe química. Os rendimentos obtidos foram 84% (TSC-09), 94% (TZ-17, após otimizações) e 60% (TZ-18, após ajustes metodológicos). As avaliações in silico indicaram que TSC-09 e TZ-17 possuem perfis farmacocinéticos promissores, com lipofilicidade moderada (LogP 2,63 e 3,63), TPSA favorável (53,65 e 39,99 Å²), biodisponibilidade de 0,55 e meias-vidas curtas, enquanto o TZ-18 apresentou boa permeabilidade intestinal (HIA 82,45%), LogP de 4,7 e meia-vida prolongada (509 min), sugerindo potencial antitumoral, mas exigindo atenção quanto à lipofilicidade e falha na regra de Muegge. A alta ligação a proteínas plasmáticas, o volume de distribuição e a metabolização dos compostos foram avaliados, fornecendo insights sobre a estabilidade e eliminação in vivo. A integração dos dados experimentais e computacionais confirmou a eficiência das rotas sintéticas, a validade estrutural dos compostos e o potencial farmacológico dos híbridos obtidos. Os resultados destacam a relevância da otimização metodológica, especialmente para os híbridos tiazólicos, e reforçam o papel das tiossemicarbazonas e tiazóis como scaffolds promissores na prototipagem de novos fármacos antitumorais. A combinação da caracterização por IR com as predições in silico oferece uma análise abrangente, evidenciando o sucesso das sínteses e estabelecendo bases sólidas para investigações futuras e possíveis aplicações terapêuticas. Agradeço à Unilab pelo financiamento da pesquisa intitulada DESENVOLVIMENTO DE PROTÓTIPOS A FÁRMACOS ANTITUMORAIS OBTIDOS A PARTIR DA ESTRATÉGIA DE HIBRIDIZAÇÃO MOLECULAR, executada entre 01/09/2024 e 31/08/2025, por meio do Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica (Pibic) e Tecnológica (Pibiti).

Palavras-chave: Tiossemicarbazonas; Tiazóis; Hibridização Molecular.

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Instituto de Ciências da Saúde, Discente,
carolineferreira@aluno.unilab.edu.br¹

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Instituto de Ciências da Saúde, Discente,
felicitymelo15@gmail.com²

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Instituto de Ciências da Saúde, Discente,
alef.unilab@gmail.com³

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Instituto de Ciências da Saúde, Docente,
jamerson@unilab.edu.br⁴