



OBTENÇÃO DE ANÁLOGOS DO RILUZOL E AVALIAÇÃO *IN SILICO* DE SUAS PROPRIEDADES TERAPÊUTICAS.

Thairinne Wippel Possamai^{1*}, Luiz Carlos Klein Junior², Fátima de Campos Buzzi².

¹Escola de Ciências da Saúde, Universidade do Vale do Itajaí, SC, Brasil. ²Programa de Pós-graduação em Ciências Farmacêuticas, Universidade do Vale do Itajaí, SC, Brasil.
*thairinne.wp@hotmail.com

INTRODUÇÃO

A escolha pelo heterociclo benzotiazol deve-se à variedade de efeitos biológicos e aplicabilidades terapêuticas já comprovados e tão desejados pela indústria. Nesta classe, encontra-se o Riluzol. Este, é o fármaco utilizado no tratamento da Esclerose Lateral Amiotrófica (ELA). ELA é uma doença neurodegenerativa progressiva, que afeta os neurônios motores do córtex cerebral, tronco encefálico e medula espinal. A sobrevida média é de 3 a 5 anos sem auxílio de ventilação mecânica (DHHS, 2013). As etapas que envolvem o planejamento, liberação, testes, e o material utilizado no desenvolvimento de um fármaco geram um alto custo. Na tentativa de amenizar estes, os testes *in silico* se destacam, visto que auxiliam na avaliação toxicológica, permitem verificar a eficácia, atividade, bioavaliabilidade, antes mesmo do composto ser submetido aos ensaios *in vitro* (ANDRADE, 2018).

MATERIAIS E MÉTODOS

uma rota adaptada ao equipamento de micro-ondas. As síntese foram realizadas a partir do 2-aminotiofenol e diferentes carboxaldeídos heterocíclicos, utilizando N,N-dimetilformamida como solvente. A reação foi submetida ao equipamento em temperatura, tempo e potência controlados. Estas reações foram monitoradas por Cromatografia em Camada Delgada (CCD) a cada 10 min até a observação do término da reação. Após verificado o término da reação, foi

definido o melhor método para precipitação e isolamento de cada produto.

RESULTADOS

Os produtos apresentaram bons rendimentos reacionais, destacando o 2-(1H-pirrol-2il)benzotiazol que apresentou maior rendimento em menor tempo reacional. Os derivados de benzotiazol, apresentaram características interessantes, mantendo-se dentro dos parâmetros estipulados, e através de técnicas espectrométricas foram confirmadas as estruturas dos produtos esperados. Os análogos foram testados *in silico* e observou-se que não apresentam risco mutagênico, carcinogênico, e nem atividade irritante. Apresentam atividade para tratamento de doenças neurodegenerativas, e ainda, atividade como proteção de membranas.

CONCLUSÃO

Os análogos do Riluzol foram satisfatoriamente obtidos e podem ser utilizados para derivações na busca de novos fármacos.

AGRADECIMENTOS

Artigo 170 / UNIVALI

REFERÊNCIAS

ANDRADE, C. R. B. 2018, UEFS.
DHHS: 2013. Nat. Inst. Of Neurol. Dis. and Strokes.