



Nos Olhos
Do
SITE
XI SEMANA
UNIVERSITÁRIA

Diversidade,
Inclusão e
Transformação Social

BIOISOSTERISMO NO DESENVOLVIMENTO DE NOVOS FÁRMACOS

William João Manuel Caiuco¹
Luciana Jakline Lopes Pires²
Morido Cá³
Jamerson Ferreira De Oliveira⁴

RESUMO

Introdução: Desenvolvimento de novos fármacos envolve a busca por moléculas capazes de apresentar elevada eficácia terapêutica, seletividade e segurança, além de propriedades farmacocinéticas adequadas. Nesse contexto, o bioisosterismo constitui uma importante estratégia da Química Medicinal para modificar estruturas químicas de moléculas bioativas sem necessariamente perder sua atividade farmacológica. A técnica consiste na substituição de um átomo, grupo funcional ou fragmento molecular por outro com características estruturais ou eletrônicas semelhantes, buscando incrementar propriedades como potência, seletividade, solubilidade, estabilidade metabólica e segurança. O bioisosterismo é considerado uma ferramenta relevante na otimização de candidatos a fármacos e tem sido aplicado em diferentes classes terapêuticas. **Objetivo:** Este trabalho tem como objetivo apresentar a importância do bioisosterismo no desenvolvimento de novos fármacos, destacando seus princípios, aplicações e contribuição para a otimização das propriedades farmacológicas e farmacocinéticas de moléculas candidatas. **Metodologia:** Foi realizada uma revisão bibliográfica de caráter qualitativo, utilizando artigos científicos e revisões disponíveis em bases de literatura científica, como PubMed /Medline, SciELO, Google Scholar com destaque para trabalhos relacionados ao bioisosterismo, Química Medicinal e descoberta de fármacos. Foram incluídos artigos científicos e artigos de revisão relacionados ao bioisosterismo e à Química Medicinal. Foram excluídos trabalhos que não estejam relacionados diretamente ao bioisosterismo ou à descoberta e otimização de fármacos. **Resultados:** O bioisosterismo permite realizar modificações estruturais planejadas em uma molécula candidata, buscando preservar ou melhorar sua interação com o alvo biológico. Essas modificações podem alterar propriedades físico-químicas importantes, como lipofilicidade, polaridade, solubilidade, estabilidade metabólica e capacidade de interação com receptores ou enzimas. Um exemplo clássico é a substituição de determinados grupos funcionais por outros que apresentem características semelhantes, mas que possam proporcionar vantagens farmacológicas. Entre as aplicações estão a redução de efeitos adversos, o aumento da potência ou seletividade e a melhoria do perfil farmacocinético. Na descoberta moderna de medicamentos, o bioisosterismo também pode contribuir para a criação de moléculas estruturalmente diferentes, mantendo características importantes para sua atividade biológica. Revisões recentes mostram que essa estratégia foi utilizada na otimização de diversos medicamentos aprovados e candidatos clínicos, com melhorias relacionadas à potência, seletividade, solubilidade e estabilidade metabólica. Além disso, diferentes grupos bioisotéricos vêm sendo estudados, incluindo substituições envolvendo compostos fluorados, heterociclos e anéis aromáticos, ampliando as possibilidades de modificação molecular durante o processo de descoberta de fármacos. **Conclusão:** Conclui-se que o bioisosterismo é uma importante ferramenta da Química Medicinal e do desenvolvimento de novos fármacos, permitindo realizar modificações estruturais capazes de melhorar propriedades farmacológicas, físico-químicas e farmacocinéticas. Dessa forma, sua aplicação contribui para a otimização de candidatos a medicamentos e para o desenvolvimento de moléculas potencialmente mais eficazes, seletivas e seguras. Em que medida este trabalho contribui para diversidade, inclusão e transformação social? Este trabalho contribui para a diversidade, inclusão e transformação social ao promover o conhecimento científico sobre o desenvolvimento de novos fármacos, buscando medicamentos mais eficazes, seguros e adequados às diferentes necessidades da população. Além disso, fortalece a formação acadêmica e incentiva a inovação na área da saúde.

Grande área do CNPq: Ciências da Saúde

Palavras-chave: Bioisosterismo; Química Medicinal; Desenvolvimento de Fármaco; Farmacologia.

Instituto de ciências da Saúde, Auroras, Discente, wmanuel266@gmail.com¹

Instituto de Ciências da Saúde, Auroras, Discente, lorespirezluciana@gmail.com²

Instituto de Ciências da Saúde, Auroras, Discente, moridoca1@gmail.com³

Instituto de Ciências da Saúde, Auroras, Docente, jamerson@unilab.edu.br⁴