



UNIVERSIDADE FEDERAL RURAL DO RIO DE JANEIRO
PRÓ-REITORIA DE GRADUAÇÃO
CÂMARA DE GRADUAÇÃO

PROGRAMA ANALÍTICO

DISCIPLINA

Código: IB722	Química Farmacêutica e Medicinal
Créditos*: 04 (2T:2P)	Carga Horária: 60 horas (30 horas teóricas e 30 horas práticas)

**Cada crédito Teórico ou Prático corresponde a 15 horas-aula*

DEPARTAMENTO DE: Ciências Farmacêuticas
INSTITUTO DE: Ciências Biológicas e da Saúde
PROFESSOR(ES): Renata Barbosa Lacerda SIAPE 1979542

OBJETIVOS:

Transmitir conhecimentos básicos sobre as bases moleculares da ação dos fármacos, os processos de planejamento racional e desenvolvimento de fármacos, assim como a ação dos mesmos em diversos sistemas terapêuticos. Aplicar os conhecimentos básicos da Química Farmacêutica Medicinal no estudo de fármacos de diferentes classes terapêuticas, com enfoque na relação entre a estrutura química, as propriedades físico-químicas e atividade farmacológica.

EMENTA:

Introdução à química medicinal e os fundamentos do planejamento de fármacos. O conceito de grupamentos farmacofóricos, toxicofóricos e auxofóricos. O composto-protótipo. A origem dos fármacos. Etapas do processo de descoberta e desenvolvimento de fármacos. Planejamento racional e as relações entre grupos funcionais e atividade biológica. Fatores estruturais físico-químicos e atividade biológica. Fatores estereoquímicos, conformacionais e atividade biológica. Relações entre a estrutura e a atividade (REA). Metabolismo de fármacos. Estudo das relações entre a estrutura química, propriedades físico-químicas e atividade biológica em classes terapêuticas representativas de fármacos, com a finalidade de compreender os mecanismos de ação em nível molecular e as estratégias empregadas no desenvolvimento dos fármacos de cada classe terapêutica.

COMPETÊNCIAS, HABILIDADES E ATITUDES*:

1. Eixo de Tecnologia e Inovação em Saúde
 - a. Pesquisar, desenvolver, inovar, produzir, controlar e garantir a qualidade de:
Fármacos, medicamentos e insumos;
Biofármacos e biomedicamentos;

*competências, habilidades e atitudes a serem desenvolvidas conforme resolução CES/CNE 06/2017

CONTEÚDO PROGRAMÁTICO:**TEÓRICO:**

1. Introdução à Química Farmacêutica Medicinal
2. A origem dos fármacos
 - 2.1 O papel dos produtos naturais na descoberta de fármacos; conceitos de grupamentos farmacofóricos, auxofóricos e toxicofóricos e de compostos-protótipos.
3. Fármacos Estruturalmente Específicos
 - 3.1 Teoria dos Receptores
4. Estudos dos fatores estruturais na atividade dos fármacos: propriedades físico-químicas e atividade biológica.
5. Introdução à Modelagem Molecular e Fármacos
6. Relação Estrutura-Atividade (REA)
7. Estudos dos fatores estruturais na atividade dos fármacos: Estereoquímica, fatores conformacionais e atividade biológica.
8. Metabolismo de Fármacos.
9. Estratégias de modificação molecular: Bioisosterismo, hibridação molecular, restrição conformacional, etc.
10. Antibióticos β -Lactâmicos.
11. Fármacos Anti-inflamatórios não-esteroidais.
12. Fármacos que atuam no sistema cardiovascular.
13. Serão desenvolvidas atividades extensionistas de acordo com a resolução CES/CNE 07/2018

PRÁTICO:

1. Introdução à modelagem molecular de fármacos: Desenho de diferentes fármacos usando programas como Marvin, ChemDraw e/ou ACD, visualização tridimensional desses fármacos em diferentes formatos, nomenclatura IUPAC, cálculo de propriedades físico-químicas;
2. Estereoquímica de fármacos cardiovasculares beta-bloqueadores: Desenho e análise conformacional do propranolol (R e S) e epinefrina (R) usando o programa PC Spartan Pro; Sobreposição tridimensional usando o programa Marvin; Importância da estereoquímica para a ação de fármacos no receptor beta-adrenérgico; Desenho dos fármacos nas suas respectivas configurações ativas; Atribuições de acordo com a regra Cahn-Ingold-Prelog;
3. Estereoquímica de fármacos – Antibióticos beta-lactâmicos: Antibióticos beta-lactâmicos: Desenho e análise conformacional da benzilpenicilina utilizando o programa Marvin e/ou Spartan / Comparação com a estrutura cristalográfica da benzilpenicilina obtida no PDB (Protein Data Banking) / Comparação com a estrutura tridimensional do dipeptídeo D-ALA-D-ALA;
4. Estudo das interações intermoleculares fármaco-receptor usando o PDB (Protein Data Banking);

XXX. – Serão desenvolvidas atividades extensionistas de acordo com a resolução CES/CNE 07/2018

BIBLIOGRAFIA: *(usar normas ABNT para as citações)*

BÁSICA:

- Barreiro, E.J. & Fraga, C.A.M., Química Medicinal: As Bases Moleculares da Ação dos Fármacos, ArtMed Editora Ltda, Porto Alegre, RS, 2ª Edição, fev. 2008.
- Williams, D. A., Lemke, T. L., Foye's principles of medicinal chemistry, 5th ed., Lippincott Williams & Wilkins, 2008.
- César Cornélio Andrei, Dalva Trevisan Ferreira, Milton Faccione, Terezinha de Jesus Faria, Da Química Medicinal à Química Combinatória e Modelagem Molecular – Um Curso Prático, Editora Manole, 2ª Edição, 2012.

COMPLEMENTAR:

- Wermuth, C. G., ed. The practice of medicinal chemistry. 3a ed. New York: Academic, 2008.
- Korolkovas, A. Química Farmacêutica, 1 ed., Guanabara Koogan, 1988.
- Silverman, R. B. The organic chemistry of drug design and drug action. 2a ed. Amsterdam: Elsevier, 2004.
- Thomas, G. Química Medicinal: uma introdução. Rio de Janeiro: Guanabara Koogan, 2003.
- Artigos científicos: RVQ, QN, QNEsc, JMC, EJMC.

PERÍODICOS CIENTÍFICOS E OUTROS (opcional)

- Artigos científicos: RVQ, QN, QNEsc, JMC, EJMC.