



Governo do Estado do Rio de Janeiro  
Secretaria de Estado de Ciência e Tecnologia  
Universidade Estadual do Norte Fluminense Darcy Ribeiro  
SECRETARIA ACADÊMICA/REITORIA

## PROGRAMA ANALÍTICO DE DISCIPLINA

Disciplina: PCN1723 - Química Medicinal

CCT/LCQUI - Laboratório de Ciências Químicas

Início: 2016/2

Pré-requisito(s): não tem

Co-requisito(s): não tem

Equivalência(s): não tem

Carga horária: 68 (68 teóricas , 0 práticas, 0 extraclasse)

Créditos: 4

Tipo de aprovação: Média/Frequência

### EMENTA

OBJETIVO: Estar apto a utilizar os conceitos e as metodologias envolvidas no planejamento racional, no metabolismo de fármacos de origem natural e sintética, bem como no entendimento da relação estrutura-atividade bio/farmacológica.

EMENTA: Introdução a Química Medicinal - suas abordagens e perspectivas. Metabolismo e mecanismos de atuação de drogas das mais diversas classes nos sistemas biológicos, enfatizando-se os aspectos estereoquímicos. Desenvolvimento de novas drogas utilizando princípios de modelagem molecular.

### CONTEÚDO PROGRAMÁTICO

Aspectos gerais de ação dos fármacos: fase farmacodinâmica, interação entre micro e macromoléculas, forças e fatores estereoquímicos relevantes para o reconhecimento molecular-ligante/sítio receptor, propriedades físico-químicas e atividade biológica. 8

Noções básicas do metabolismo de fármacos: fundamentos do metabolismo dos fármacos. 8

A origem dos fármacos: diversidade molecular dos produtos naturais, moléculas protótipos, o acaso na descoberta dos fármacos, fármacos sintéticos. 8

Planejamento racional baseado no mecanismo de ação: descoberta da substância protótipo, otimização do protótipo, identificação dos sítios farmacofóricos. 8

Importância do conhecimento do mecanismo molecular de ação dos fármacos: inibição suicida de -lactamase pelo ácido clavulânico, Inibição suicida de protease serínica (Ser-Protease), análogos de estado de transição, produtos naturais como modelos de mecanismos moleculares de ação. 10

Importância dos fatores conformacionais: conformação e complementaridade molecular, fatores conformacionais e neurotransmissores, conformação farmacofórica, conformação em sistemas tricíclicos, efeitos conformacionais em análogos de nucleosídeos, efeito orto, isômeros geométricos, importância da configuração absoluta. 10

Estratégias de modificação molecular: bioisosterismo, restrição conformacional, hibridação molecular no desenho de novos fármacos. 8

Estudo de casos de planejamento de fármacos: casos clássicos e casos da literatura atual 8

### BIBLIOGRAFIA

1. ANDREI, C. C.; FERREIRA, D.T.; FACCIONI, M.; FARIA, T. J. Da química medicinal a química combinatória e modelagem molecular: um curso prático. São Paulo: Manole, 2003.
2. BARREIRO, E. J.; FRAGA, C. A. M. Química medicinal as bases moleculares da ação de fármacos, 2ª edição. Porto Alegre: Artmed, 2008.
3. FOYE, W. O., LEMKE, T. L., WILLIAMS, D. A. Principles of Medicinal Chemistry, Williams & Wilkins, 1995.
4. GRAHAM, L. P. An Introduction to Medicinal Chemistry 2 a ed. New York: Oxford University Press, 1995.
5. PATRICK, G. L. An introduction to medicinal chemistry, New York: Oxford University Press Inc., 1995.



Governo do Estado do Rio de Janeiro  
Secretaria de Estado de Ciência e Tecnologia  
Universidade Estadual do Norte Fluminense Darcy Ribeiro  
SECRETARIA ACADÊMICA/REITORIA

6. THOMAS, G. Química Medicinal - Uma introdução, Rio de Janeiro: Guanabara Koogan, 2003.  
Artigos de periódicos como: Journal of Medicinal Chemistry, Drugs of Today, Química Nova, Brazilian Journal of Pharmaceutical Sciences, entre outros.