



Universidade Federal do Rio de Janeiro

# *Estratégias de desenho molecular*

## *da Química Medicinal*

### *A abordagem fisiológica – Parte 1*

IX Semana de Química / DQ-UFSCar



***Eliezer J. Barreiro***

**Professor Titular**

**Universidade Federal do Rio de Janeiro**



**Laboratório de Avaliação e Síntese de Substâncias Bioativas**

<http://www.farmacia.ufrj.br/lassbio>

**Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia de Fármacos e Medicamentos  
(INCT-INOVAR)**



Universidade Federal do Rio de Janeiro



Cidade Universitária, ilha do Fundão

# Química Medicinal

De onde venho...



Laboratório de Avaliação e Síntese de Substâncias Bioativas

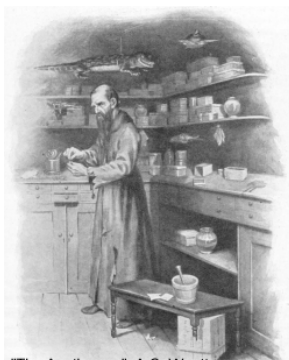
19/04/1994 Laboratório de Avaliação e Síntese de Substâncias Bioativas







Universidade Federal do Rio de Janeiro



"The Apothecary", A.C. Woolton. (Chronicles of Pharmacy Vol II 1910)

Como **n**a **S**Ce m  
OS fármacos?

Química Medicinal



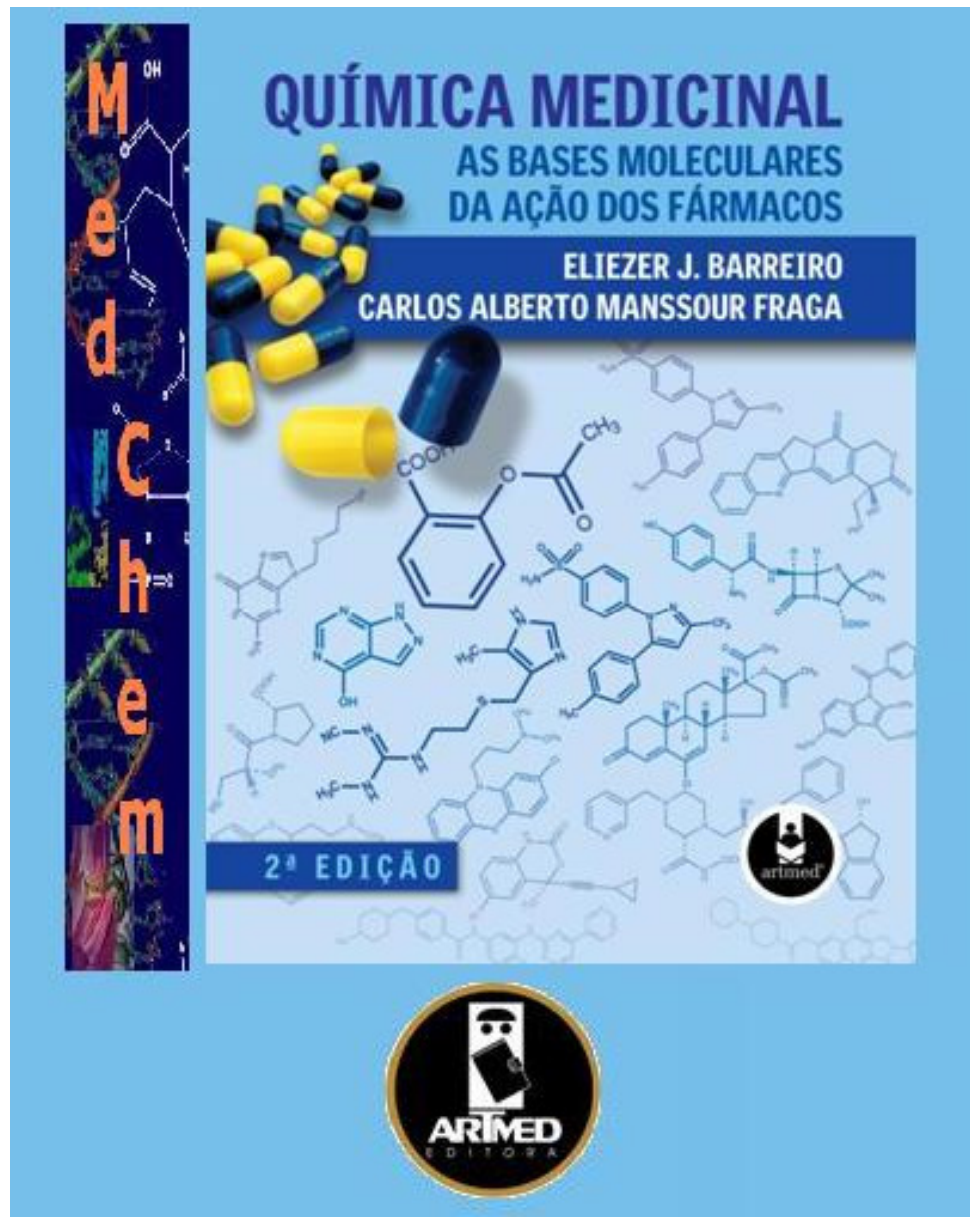
Química Medicinal

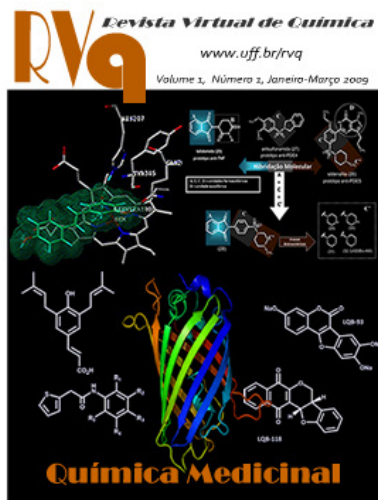




Universidade Federal do Rio de Janeiro

# Bibliografia





[www.uff.br/rvq](http://www.uff.br/rvq)

Artigo de Divulgação

## A Química Medicinal e o paradigma do composto-protótipo

Barreiro, E. J.\*

*Rev. Virtual Quim.*, 2009, 1 (1), 18-26. Data de publicação na Web: 30 de Janeiro de 2009

<http://www.uff.br/rvq>

---

*Inter-alia*: RS Bastos, BV Silva, AC Pinto, A química medicinal brasileira de 1998 a 2008 nos periódicos *Journal of Medicinal Chemistry*, *Bioorganic and Medicinal Chemistry*, *Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters* e *European Journal of Medicinal Chemistry*, *Rev. Virtual Quim.* **2009**, 1, 67-86; LM Lima, *Quim. Nova* **2007**, 30, 1456





Laboratório de Avaliação e Síntese de Substâncias Bioativas

Faculdade de Farmácia  
UFRJ



Área de Atuação [links](#) [Equipe](#) [Contato](#) [Home](#)

LASSBio, interesses de pesquisa

Publicações Selecionadas

Teses e Dissertações

Escolas de Verão

Projetos de Pesquisa em Andamento

Tópicos de Interesse em Química Farmacêutica Medicinal

**Cursos** → 2012

Conferências



28 de janeiro a 01 de fevereiro

INSCRIÇÕES:  
a partir de 01 de setembro 2012

[Certificados da XVIII EVQFM disponíveis para download](#)

### 5 VISÕES DA QUÍMICA FARMACÊUTICA MEDICINAL

XVIII Escola de Verão em Química Farmacêutica Medicinal traz especialistas do Brasil e do exterior para participar de Ciclo de Conferências na área.

[Leia mais](#)



[www.farmacia.ufrj.br/lassbio](http://www.farmacia.ufrj.br/lassbio)



1. **Definição & histórico da Química Medicinal: os pioneiros e as moléculas pioneiras;**

---

2. Os fármacos e seus biorreceptores: o paradigma de Fischer-Ehrlich;

---

3. A origem dos fármacos: *domesticando* e se inspirando nos produtos naturais;

---

4. A fascinante criatividade da natureza & as moléculas “*impossíveis*” que viraram fármacos;

---

5. Do *bolor* às moléculas salva-vidas ou **bilionárias**;

---

6. A era dos fármacos sintéticos racionalmente planejados;

---

7. Considerações finais



# IUPAC - Subcommittee Medicinal Chemistry & Drug Development

**Química Medicinal** é a **disciplina** que

**estuda** os **aspectos relacionados**

à ***descoberta*** ou ***invenção*** de **fármacos**, os

**aspectos moleculares** envolvidos em seu

**mecanismo de ação** e **aqueles que** governam a

***absorção***, ***distribuição***, ***metabolismo***, ***eliminação***

e ***toxicidade*** (**ADMET**), incluindo a **compreensão**

da **relação entre a estrutura química** e a

**atividade terapêutica** (REA).







*Quim. Nova*, Vol. 25, No. 3, 505-512, 2002.

## GLOSSÁRIO DE TERMOS USADOS NO PLANEJAMENTO DE FÁRMACOS (RECOMENDAÇÕES DA IUPAC PARA 1997)

**Carlos Mauricio R. Sant'Anna\***

Departamento de Química, Universidade Federal Rural do Rio de Janeiro, 23851-970 Seropédica - RJ; Departamento de Fármacos, Universidade Federal do Rio de Janeiro, 21949-910 Rio de Janeiro - RJ

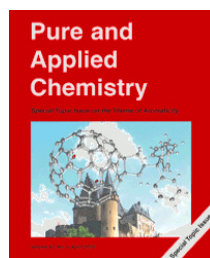
Recebido em 13/12/01

*O presente glossário é uma tradução para o português (aprova-  
da pelo Comitê Brasileiro para Assuntos de Química junto à IUPAC)  
do artigo Glossary of Terms Used in Computational Drug Design  
publicado em Pure Appl. Chem. 1997, 69, 1137, preparado por H.  
van de WaterBeemd, M. S. Tute, R. E. Carter, G. Grassy, H. Kubinyi,  
Y. C. Martin e P. Willet.*



► **Glosario de términos de Química Medicinal**

<http://www.chem.gmw.ac.uk/iupac/medchem/>



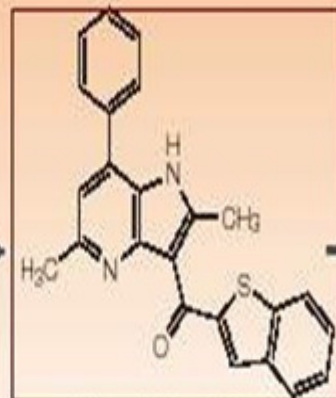


## Fase pré-clínica

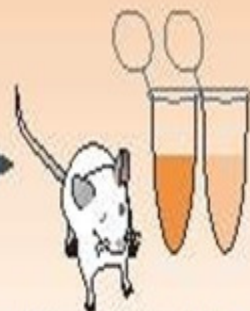
Química Medicinal



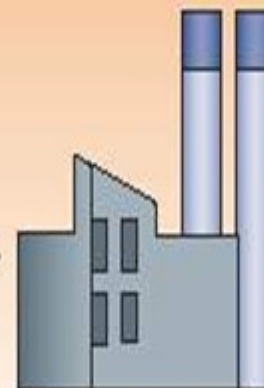
Equipe de pesquisa



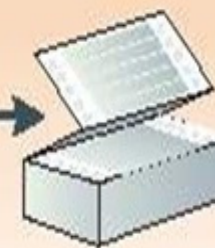
Lead compound  
Composto-protótipo



Bioensaios *in vivo*  
para identificação  
do novo composto-  
protótipo

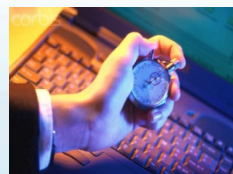


Estudos de  
formulação,  
estabilidade,  
escalonamento



Dossiê a  
agências  
regulatórias

## Estudos clínicos



O processo do desenvolvimento de novos fármacos é complexo...

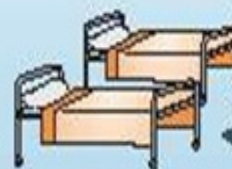


Novo  
fármaco

ANVISA



Dossiê final



Fase 3  
*clinical trials*



Fase 2:  
eficácia



Fase 1:  
tolerância





ERROR: stackunderflow  
OFFENDING COMMAND: ~  
STACK: