

ESTRUTURA QUÍMICA DE FÁRMACOS SOB A PERSPECTIVA DA INTEGRAÇÃO CURRICULAR

Regina Cláudia de Matos Dourado (PQ), Arlandia Cristina Lima Nobre de Morais (PQ), Sandra Maria Rocha (PQ), Vânia Cordeiro de Matos (PQ), Grazielly Oliveira Inácio Rodrigues (IC)

*arlandia@unifor.br

Curso de Farmácia. Universidade de Fortaleza (UNIFOR). Av. Washigton Soares, 1321, CEP: 60811-905, Fortaleza, Ceará, Brasil.

Palavras Chave: química farmacêutica, química orgânica, integração curricular.

Introdução

O conhecimento da relação estrutura-atividade é um dos principais objetivos de aprendizagem da Química Farmacêutica. Neste contexto, diversos conceitos, vistos nas aulas de Química Orgânica, passam a ter importância fundamental. Neste sentido, o uso de programas computacionais para o desenho de fórmulas estruturais de fármacos foi à estratégia metodológica selecionada para o desenvolvimento do presente trabalho de iniciação à docência com o objetivo de realizar atividades que promovam a integração e promoção do processo de ensino-aprendizagem entre Química Orgânica e Química Farmacêutica. Os alunos da disciplina de Química Farmacêutica empregaram o programa computacional ChemsKetch de livre acesso na Internet, para o desenho da estrutura química de fármacos pertencentes às principais classes farmacológicas. Os alunos de Química Orgânica realizaram a verificação das estruturas químicas desses fármacos através do preenchimento de um questionário padronizado para a identificação dos aspectos estruturais: presença de anel aromático, heteroátomos, identificação dos grupos funcionais e carbonos quirais.

Resultados e Discussão

Foram desenhadas 167 estruturas. Conforme a verificação realizada pelos alunos, 91% das estruturas apresentaram anel aromático (benzeno ou fenil) correlacionado-se com a lipossolubilidade e coeficiente de partição dos fármacos. A maioria desses anéis (54%) são dissubstituídos na posição *para* e os estudos da relação estrutura-atividade, geralmente, mostram que a substituição na posição *para* apresenta menor impedimento estérico favorecendo a ligação fármaco-receptor. Quanto à presença de heteroátomos foi verificado que 89% são compostos nitrogenados, 56,8% são oxigenados e

13,7% apresentam enxofre em sua estrutura. Os grupos funcionais polares mais encontrados foram álcool (24,5%), éter (42,5%), amina (98,8%), amida (25,7%), ácido carboxílico (8,9%), éster (15,6%) e haletos de alquila (17,9%). A introdução de grupos funcionais polares na estrutura de fármacos pode ser correlacionada com os fatores farmacocinéticos, inclusive com as vias metabólicas e tipos de interações intermoleculares formadas entre fármaco-receptor. A presença de carbono quiral foi verificada em 72 estruturas. Esse aspecto estereoquímico chama a atenção, pois significa que 43% dos fármacos verificados são quirais e, conseqüentemente, apresentam estereoisômeros que podem diferir farmacologicamente.

Conclusões

Este trabalho mostrou que o envolvimento da monitoria em novas atividades didáticas representa um importante instrumento para promover a integração dos conteúdos mais significativos das disciplinas que se complementam. A utilização de programas computacionais para o desenho de cada ligação química presente nas estruturas dos fármacos motiva e estimula os alunos a terem um olhar mais atencioso para observar os detalhes que podem explicar as propriedades físico-químicas e farmacológicas.

Referências

BARREIRO, E. J.; MANSSOUR, C. A.; Química medicinal: as bases moleculares da ação dos fármacos. 2ªed., 2008.
CARVALHO, I. PUPO, M. T.; BORGES, A. D. L.; BERNARDES, L. S. C., Introdução à modelagem molecular de fármacos no curso experimental de química farmacêutica. Química Nova v. 26, n.3, São Paulo, 2003.
GARETH, T. Química Medicinal: uma introdução. 1ª ed., 2003.
KATZUNG, B. G. Farmacologia básica e clínica. 10ªed., 2010.