

Química Medicinal e o planejamento de fármacos

SQM5811

Informações sobre a disciplina

Informações sobre a disciplina

- ***Aulas:***

Prof. Dr. Andrei Leitão.

Bloco de aulas Q5 do IQSC.

Maiores informações: <https://edisciplinas.usp.br/course/view.php?id=91859>

Bibliografia:

- Montanari, C.A. Química Medicinal. Métodos e fundamentos em planejamento de fármacos, Edusp, 2011.
- Patrick, G. L. An Introduction to Medicinal Chemistry, 5th Edition, Oxford University, 2013.
- Wermuth, C.G.; Aldous, D.; Raboisson, P.; Rognan, D. The Practice of Medicinal Chemistry, 4th Edition, Academic Press, 2015.
- Silverman, R.B.; Holladay, M.W. The Organic Chemistry of Drug Design and Drug Action, 3rd Edition, Academic Press, 2014.
- Williams, D.A. Foye's Principles of Medicinal Chemistry, 7th edition, LWW, 2012.
- Abraham, D.J.; Rotella, D.P. Burger's Medicinal Chemistry, Drug Discovery and Development, 8 Volume Set, 7th Edition, Wiley, 2010

Cronograma de aulas

Aulas	Programa resumido
1, 2	Introdução à química medicinal e ao planejamento de substâncias bioativas: SBDD (baseado na estrutura da macromolécula) e LBDD (baseado na estrutura do ligante).
3	Planejamento combinado. Fase farmacodinâmica da substância bioativa.
4	Fase farmacodinâmica
5	Interações intermoleculares, análise de estruturas tridimensionais. Ensaio bioquímicos e biofísicos para quantificação da interação bimolecular.
6	Empirismo & diversidade: ensaios em massa (HTS e HCS); química combinatória. Espaço químico-biológico.
7	Apresentação de trabalho.

Cronograma de aulas

Aulas	Programa resumido
8	Regra dos 5 de Lipinski, propriedades de molécula matriz. Propriedades físico-químicas: lipofilia, solubilidade, estabilidade.
9	Regra dos 3 para fragmentos. Planejamento baseado em fragmentos.
10	Uso do computador no planejamento de substâncias bioativas.
11	Uso do computador no planejamento de substâncias bioativas.
12	Apresentação de trabalho.
13	Desenvolvimento de substâncias bioativas.
14	Exemplos aplicados para classes de fármacos desenvolvidas.
15	Avaliação

Demais informações

Avaliações:

Uma avaliação (total: 4 pontos)

Dois trabalhos (total: 6 pontos)

Conceito na disciplina:

Os valores obtidos nas avaliações ao longo do semestre serão somados e o resultado final será transformado em conceito (A, B, C).