

## Química Medicinal: Como Fazer Fármacos Seguros e Eficientes, da Bancada para o Mercado

*Alexandra Antunes*

Longe vamos dos tempos em que a descoberta de novos fármacos se baseava na tentativa/erro, intuição ou sorte. Hoje em dia, graças aos avanços nas ciências biológicas, temos um conhecimento mais profundo dos alvos biológicos a atingir para alcançar um determinado efeito farmacológico. Desta forma, o desenho de novos fármacos é efectuado numa fase inicial, com a ajuda da modelação molecular, de modo a se conseguir uma interacção forte e o mais selectiva possível com o alvo terapêutico (farmacodinâmica). No desenho de fármacos temos que ter em conta que este terá que viajar por todo o corpo antes de atingir o alvo terapêutico e temos que garantir que esta missão é cumprida (farmacocinética). Neste contexto, o conhecimento dos mecanismos de toxicidade envolvidos noutros fármacos (toxicologia molecular) tem um papel importante para o desenho de fármacos mais seguros.



### Conceitos importantes sobre a Química Medicinal:

- ✓ Consiste no desenho e síntese de novos fármacos baseado no conhecimento do modo como estes fármacos se comportam no nosso organismo ao nível molecular.
- ✓ Ciência interdisciplinar que envolve, nomeadamente, conhecimentos de química, bioquímica, fisiologia, farmacologia e modelação molecular.
- ✓ Um fármaco é, em geral, um composto químico de baixo peso molecular que deverá interagir com um determinado alvo molecular (em geral macromoléculas biológicas) de modo a produzir um efeito farmacológico. O efeito poderá ser benéfico ou prejudicial dependendo da dose administrada.



## Da bancada para o mercado

Identificação do alvo terapêutico e descoberta da composto químico que vai interagir com este alvo – composto protótipo

Compostos análogos são sintetizados e analisados de modo a se estabelecer uma relação estrutura/actividade, conduzindo à preparação de compostos com propriedades farmacocinéticas e farmacodinâmicas melhoradas

Testes pré-clínicos e clínicos são efectuados para testar a segurança do novo fármaco

## Qual o papel do Químico?

Os químicos têm um papel importante nas fases iniciais de desenho e desenvolvimento de novos fármacos:

- ✓ Desenvolve vias sintéticas para a preparação dos vários análogos do composto protótipo.
- ✓ Determina as estruturas dos vários compostos que estão a ser preparados recorrendo a técnicas como a ressonância magnética molecular e a espectrometria de massa.
- ✓ Sintetiza os possíveis metabolitos dos fármacos para que os seus efeitos laterais e actividade possam ser testados.
- ✓ Desenvolve métodos sintéticos para a produção do fármacos em larga-escala.
- ✓ Controla a qualidade do fármaco produzido.