



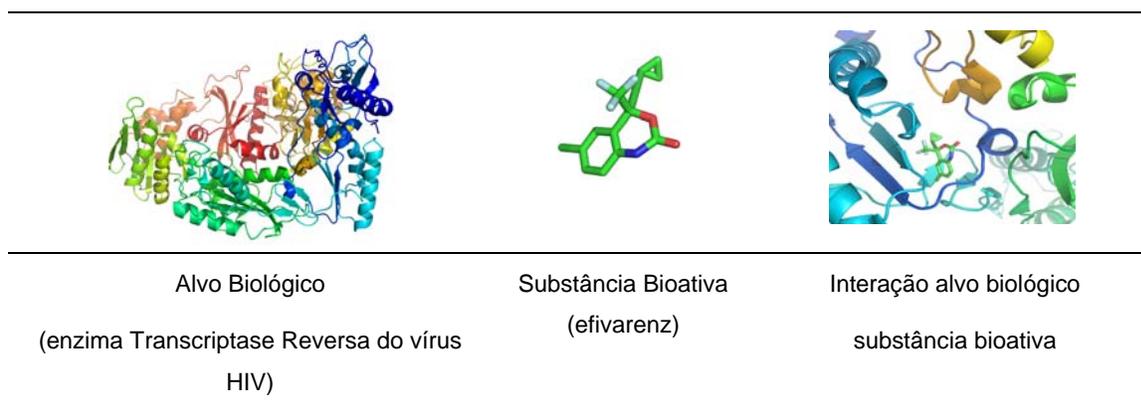
## Química e Informática: União Perfeita para o Desenvolvimento de Fármacos

Os efeitos de muitos fármacos resultam de sua interação com alvos biológicos, por exemplo, enzimas. Uma das razões para explicar a afinidade de um fármaco por seu receptor no organismo está relacionada com a estrutura química do fármaco. Portanto, o estudo das propriedades químicas de um possível fármaco é de extrema importância para alcançar os efeitos biológicos desejados. Devido o interesse no desenvolvimento de novos fármacos, uma nova área de pesquisa foi iniciada: Química Medicinal. O principal objetivo da Química Medicinal é estudar as origens moleculares da atividade biológica dos fármacos, a partir da relação entre a estrutura química e a atividade biológica/farmacológica das substâncias em estudo. Sendo assim, a Química Medicinal pode auxiliar na proposição de modificações na estrutura molecular com o objetivo de obter fármacos mais potentes e com menores efeitos colaterais. Devido à complexidade envolvida nos estudos na área de Química Medicinal, tornou-se necessária a interação entre diversas áreas da ciência, tais como: química, farmacologia, informática, biologia molecular, entre outras. Uma outra área que muito contribui para os estudos em química medicinal é a química de produtos naturais, pois a procura por substâncias bioativas tem assumido um importante papel na sociedade devido ao aumento da população e a consequente demanda por alimentos, medicamentos e melhores condições de vida.

Uma das razões pelo interesse em aplicar conceitos de Química Medicinal durante o processo de planejamento de novas substâncias bioativas está no fato de que as indústrias farmacêuticas estão sob constante pressão em aumentar o sucesso de novos fármacos no mercado. Estima-se que, em média, são necessários 14 anos para o desenvolvimento de um novo fármaco e os custos associados a este processo são enormes. Nos dias atuais, verifica-se um aumento considerável nos investimentos em novas tecnologias que possam resultar em um número maior de fármacos, com maior potência, menores efeitos colaterais e que rendam grandes quantias de lucros. Nas últimas décadas, uma das grandes revoluções no processo de desenvolvimento de novos fármacos está relacionada com o emprego de computadores durante todo o processo de desenvolvimento de novas substâncias bioativas. A aplicação de métodos computacionais em problemas de natureza química é uma área de pesquisa conhecida como Química Computacional ou Químioinformática, que vem sendo aplicada com sucesso no estudo dos fatores responsáveis pela atividade



biológica de fármacos em nível molecular. A atividade de compostos biologicamente ativos está condicionada às suas propriedades químicas, considerando que estes compostos necessitam atravessar os tecidos do sistema biológico e alcançar seus respectivos receptores para que possam interagir. Para isso, técnicas computacionais modernas vêm sendo muito utilizadas, pois são ferramentas cada vez mais importantes para a visualização, compreensão e predição de fenômenos químicos. Sendo assim, os métodos de quimioinformática podem ser utilizados em estudos de Química Medicinal com os seguintes objetivos: (i) construir modelos bi e tridimensionais de moléculas (fármacos e proteínas); (ii) simular a interação entre uma substância química (fármaco) e seu respectivo receptor biológico (proteína) utilizando programas computacionais de alto desempenho; (iii) empregar conceitos químicos fundamentais para entender o funcionamento de um fármaco no organismo. A Figura 1 ilustra as principais etapas envolvidas em um estudo de Química Medicinal que utiliza métodos de quimioinformática.



**Figura 1.** Aplicação de métodos de quimioinformática em estudos de Química Medicinal.

**Por:** Káthia M. Honório, Professora Doutora da Escola de Artes, Ciências e Humanidades da USP

kmhonorio@usp.br