

2ª MOSTRA DE TALENTOS DA GRADUAÇÃO









Estudos sobre o desenvolvimento racional de drogas (*drug design*) e suas perspectivas para a produção de novos fármacos

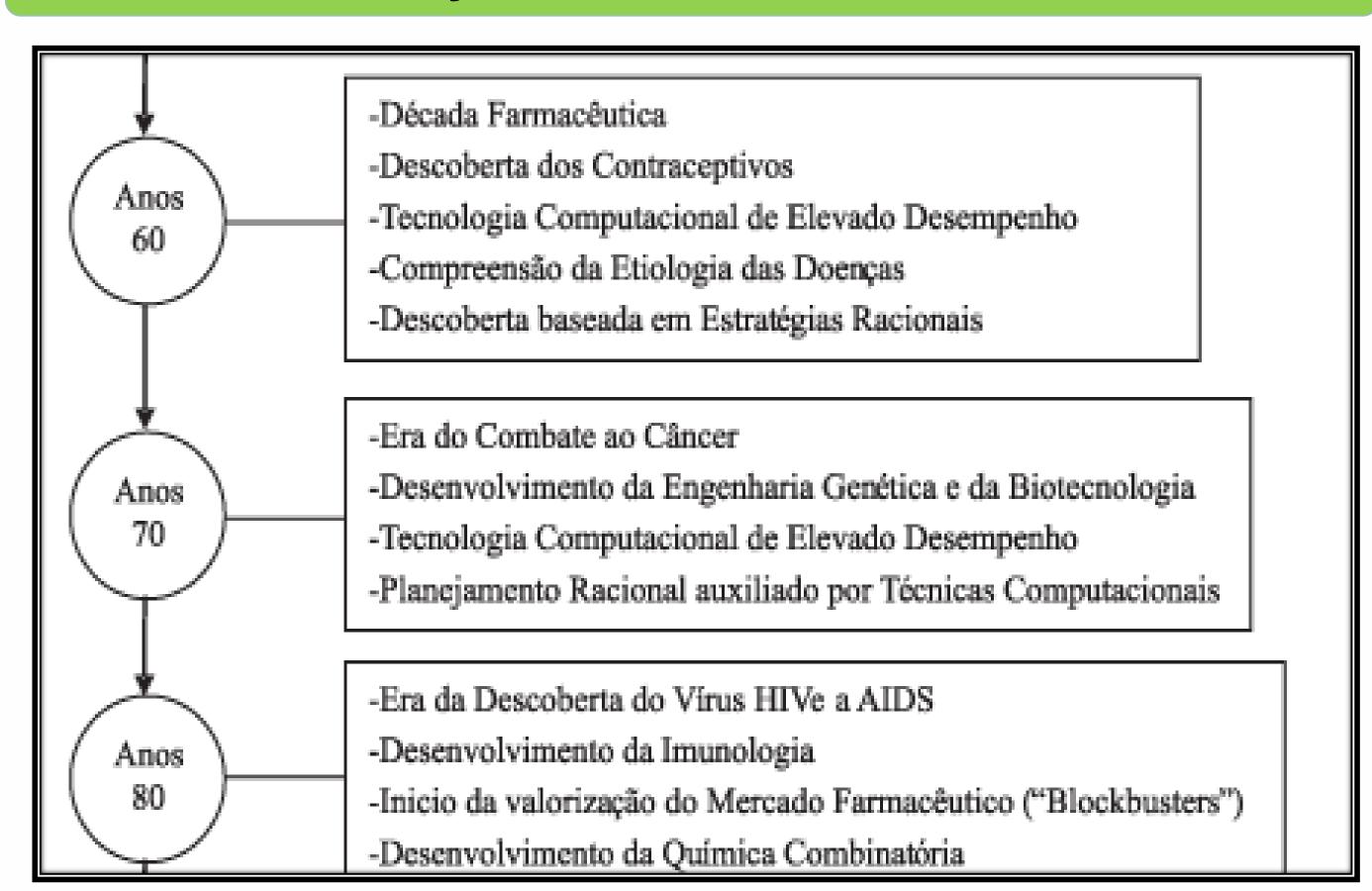
Michelle Maia Cardoso

michelle cardoso1994@hotmail.com

FACULDADE DE QUÍMICA

Orientador: Prof. Dr. Augusto Etchegaray Júnior <u>augusto.etchegaray@puc-campinas.edu.br</u>

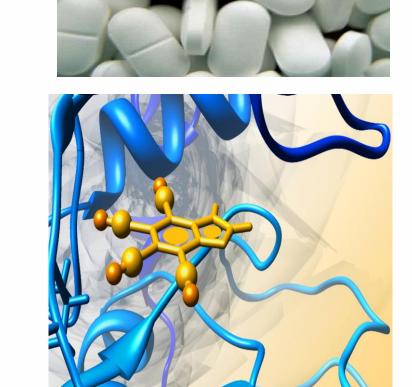
Introdução: a era dos fármacos



Fonte: Adaptado de BARREIRO; FRAGA, 2005

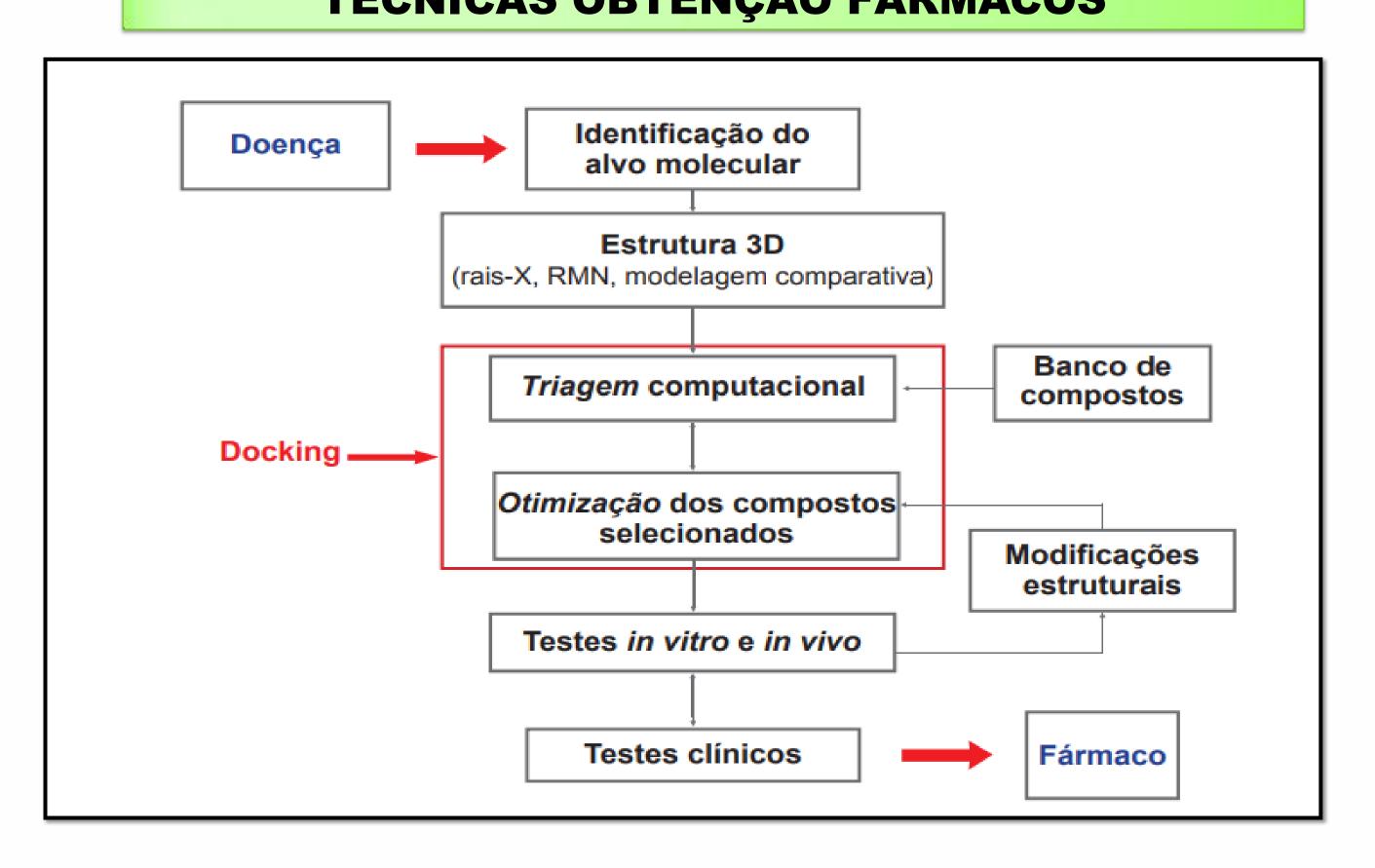
Objetivos

• Conceituar o processo de planejamento racional de fármacos conhecido como *Drug design* ou *rational drug design, aliada com várias técnicas atuais de obtenção de novos medicamentos.*



OUtilizar a AIDS, como principal exemplo do planejamento de fármacos, com foco em um medicamento inibidor do HIV, o Indinavir.

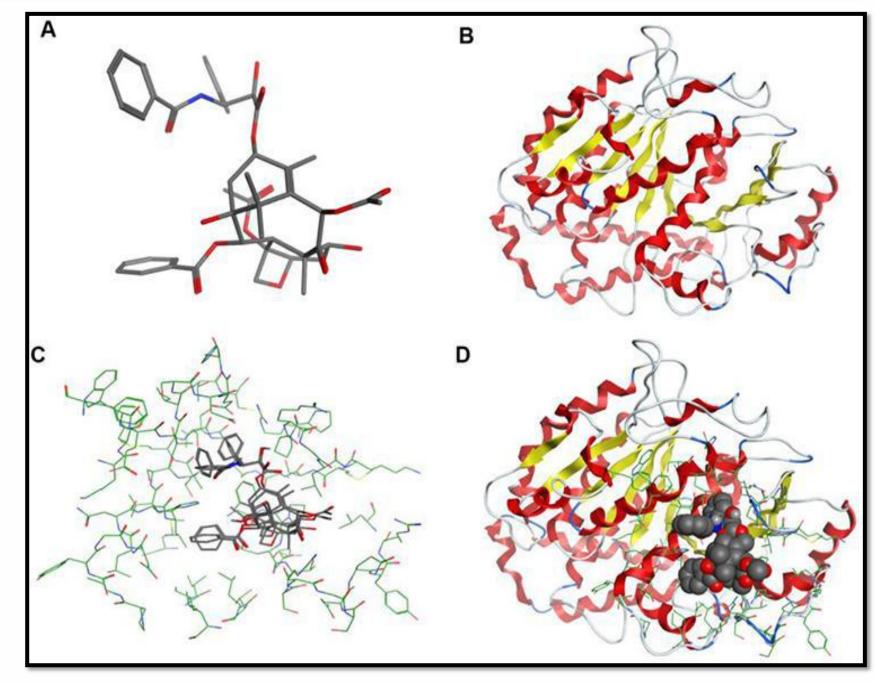
TÉCNICAS OBTENÇÃO FÁRMACOS



DOCKING MOLECULAR

<u>Metodologia</u>

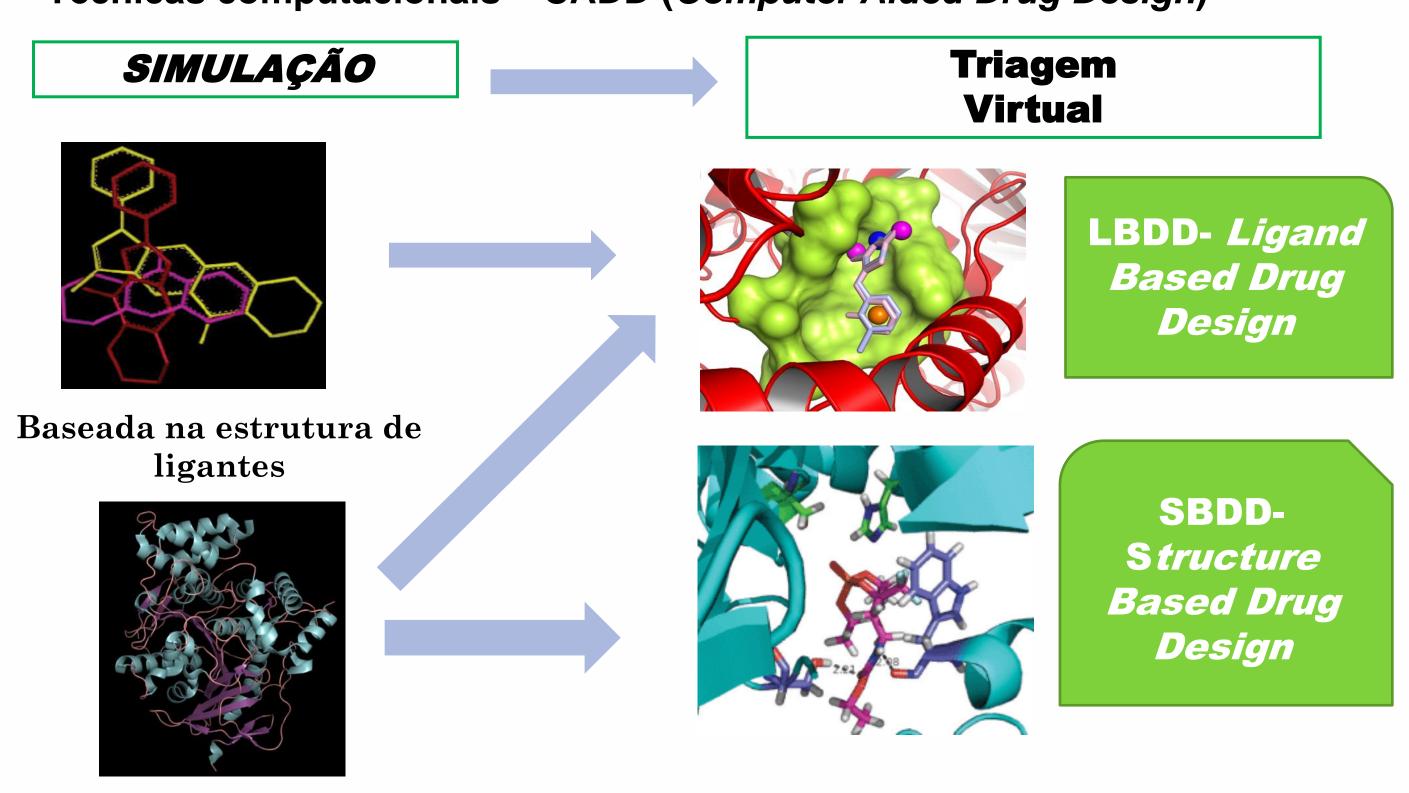
- A- Estrutura ligante;
- B- Estrutura receptor (alvo);
- C- Interação ligantereceptor (variedades de encaixe);
- D- Melhor interação intermolecular ligante e superfície receptor.



Fonte: LO, Y.C.et al,2017

BIOINFORMÁTICA

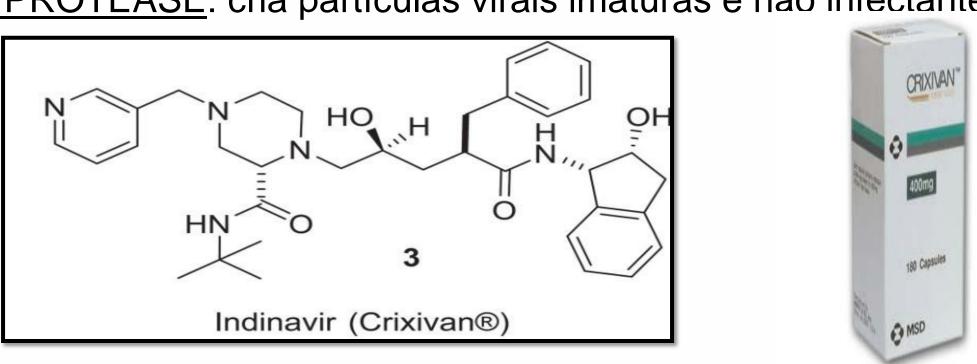
Técnicas computacionais – CADD (Computer Aided Drug Design)



Baseada na estrutura do receptor (alvo molecular)

INDINAVIR (CRIXIVAN®)

• INIBIÇÃO DA PROTEASE: cria partículas virais imaturas e não infectantes .



CONCLUSÕES

- Novas técnicas de obtenção de medicamentos: aumentar a eficácia do processo de pesquisa e desenvolvimento de fármacos.
- Utilização de novas tecnologias que são mais rápidas para desenvolver novas formulações medicamentosas e de razoável custo para o cenário da indústria farmacêutica atual.