

Programa Analítico de Disciplina

QUI 323 - Química Bioinorgânica

Departamento de Química - Centro de Ciências Exatas e Tecnológicas

Catálogo: 2024

Número de créditos: 4

Carga horária semestral: 60h

Carga horária semanal teórica: 4h

Carga horária semanal prática: 0h

Carga horária de extensão: 0h

Semestres: II

Objetivos

Introduzir conceitos e definições iniciais importantes em Química Bioinorgânica. Abordar aspectos da Química Inorgânica em âmbito biológico (fisiológicos, patológicos e toxicológicos associados a íons metálicos). Discutir e revisar pontos da Química Inorgânica necessários à Química Bioinorgânica como a Teoria do Campo Cristalino (TCC), interações intermoleculares, equilíbrios de complexação, além das definições de acidez e basicidade. Apresentar e discutir estruturas e propriedades de ligantes em química de coordenação no contexto biológico, proteínas e ácidos nucleicos. Descrever características estruturais de metaloenzimas à base de Zn, Fe, Mn e outros metais essenciais e sua correlação a processos vitais. Explicitar as características gerais de fármacos baseados em metais e os principais mecanismos correlacionados. Contemplar os compostos metálicos empregados na clínica médica como agentes terapêuticos, de contraste e de diagnóstico: platina, lítio, ferro, manganês, antimônio, gálio e tecnécio. Apresentar os ensaios de avaliação *in silico* via modelagem molecular (docking molecular), pré-clínicos e clínicos (*in vitro* e *in vivo*) de candidatos a metalofármacos. Discutir algumas técnicas empregadas na avaliação biológica de candidatos a metalofármacos: Microscopia de Transmissão Eletrônica (MET), espectroscopias eletrônica na região do UV e do visível, de ressonância magnética nuclear (RMN) e Mössbauer.

Ementa

Conceitos e definições importantes em Química Bioinorgânica. Aspectos fisiológicos, patológicos e toxicológicos associados a íons metálicos. Teoria do Campo Cristalino. Interações intermoleculares. Equilíbrios de complexação. Conceitos de acidez e basicidade (Lewis e Pearson). Metaloenzimas à base de Zn, Fe, Mn e outros metais e sua correlação a processos vitais. Características gerais de fármacos baseados em metais e principais mecanismos exibidos. Compostos metálicos empregados na clínica médica como agentes terapêuticos, de contraste e de diagnóstico: platina, lítio, ferro, manganês, antimônio, gálio e tecnécio. Planejamento racional de fármacos: Avaliação *in silico* via modelagem molecular (docking molecular), ensaios pré-clínicos e clínicos (*in vitro* e *in vivo*). Algumas técnicas empregadas na avaliação biológica de candidatos a metalofármacos: Microscopia de Transmissão Eletrônica (MET), espectroscopias eletrônica na região do UV e do visível, de ressonância magnética nuclear (RMN) e Mössbauer.

Pré e correquisitos

QUI 320

Oferecimentos obrigatórios

Não definidos

Oferecimentos optativos	
Curso	Grupo de optativas
Licenciatura em Química	Geral
Química - Bacharelado	Geral
Química - Licenciatura (Integral)	Geral

QUI 323 - Química Bioinorgânica

Conteúdo					
Unidade	T	P	ED	Pj	To
<p>1. Introdução à Química Bioinorgânica</p> <p>1. A Química Bioinorgânica e sua interdisciplinaridade: Conceitos e definições.</p> <p>2. A Química Inorgânica em sistemas biológicos: Aspectos fisiológicos, patológicos e toxicológicos exibidos por íons metálicos.</p> <p>3. Breve histórico da Química Medicinal e o conceito de fármacos.</p> <p>4. Fármacos baseados em metais - Uma breve introdução: Propriedades gerais e tipos (sais metálicos e compostos de coordenação); vantagens e desvantagens em relação aos fármacos orgânicos; transporte no sangue via proteínas albumina e transferrina.</p>	5h	0h	0h	0h	5h
<p>2. Aspectos gerais da Química Inorgânica no contexto biológico</p> <p>1. A Teoria do Campo Cristalino (TCC): Formação de complexos octaédricos, tetraédricos e quadráticos, isomeria, a série espectroquímica, parâmetros de estabilidade (10 Dq e Energia de estabilidade do Campo Cristalino – EECC), espectroscopia eletrônica.</p> <p>2. Ligantes em sistemas biológicos: Proteínas e ácidos nucleicos.</p> <p>3. Interações intermoleculares envolvendo macromoléculas biológicas.</p> <p>4. Equilíbrios de complexação e as constantes de formação para complexos.</p> <p>5. Os conceitos de ácidos e bases com ênfase nas propostas de Lewis e Pearson.</p>	20h	0h	0h	0h	20h
<p>3. Metaloproteínas no organismo humano e seu papel biológico</p> <p>1. Estruturas e propriedades gerais de proteínas e enzimas baseadas em metais.</p> <p>2. Zinco: Enzima conversora da angiotensina (ECA) e a hipertensão arterial; anidrase carbônica e regulação do pH do sangue; álcool e formaldeído desidrogenases e o metabolismo do etanol.</p> <p>3. Ferro: Hemoglobina e o transporte de oxigênio em mamíferos; catalase e processos oxidativos; citocromos e a cadeia respiratória.</p> <p>4. Manganês: Superóxido Dismutase e o processo de estresse oxidativo.</p> <p>5. Outras metaloenzimas de relevância (Cu, V, Ni e outros metais essenciais).</p>	10h	0h	0h	0h	10h

A autenticidade deste documento pode ser conferida no site <https://siadoc.ufv.br/validar-documento> com o código: DDSU.ETII.46PE

<p>4. Metalofármacos</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Mecanismos exibidos por fármacos baseados em metais: Terapia, Radioterapia e Terapia Fotodinâmica, principais características. 2. Terapia ou tratamento de doenças: Ligação direta entre o metal e o alvo biológico, liberação de um ligante biologicamente ativo, atividade redox. 3. Radioterapia e agentes de diagnóstico: O conceito de radiofármacos, o núcleo atômico e processos de decaimento radioativo, agentes de contraste e a técnica de espectroscopia por ressonância magnética nuclear (RMN). 4. Terapia fotodinâmica: Definição e processos oxidativos. 5. Estudos de caso: Exemplificação dos mecanismos de ação de antitumorais à base de platina; derivados de lítio nos tratamentos do transtorno bipolar do humor e de doenças neurodegenerativas; o anti-hipertensivo nitroprussiato de sódio®; fármacos baseados em antimônio no tratamento da Leishmaniose; manganês e o emprego de seus complexos no tratamento da esclerose lateral amiotrófica (ELA); tecnécio na radioterapia do câncer; gálio e o uso de seus compostos como agentes de contraste e de diagnóstico de doenças. 6. Estratégias para obtenção e investigação da ação dos metalofármacos. 7. Planejamento racional de fármacos e o uso de técnicas computacionais de modelagem molecular: Docking molecular e a avaliação in silico de ligantes bioativos; emprego de softwares gratuitos para experimentos de docking molecular. 8. Testes pré-clínicos (ensaios in vitro e in vivo): Testes de atividade, dose adequada, toxicidade frente à cultura de células, potencial mutagênico e cobaias. 9. Testes clínicos: Fases 0, I, II e III. 	20h	0h	0h	0h	20h
<p>5. Técnicas empregadas na avaliação biológica de candidatos a metalofármacos</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Microscopia de Transmissão Eletrônica (MET). 2. Espectroscopia Eletrônica na região do UV e do visível. 3. Espectroscopia de Ressonância Magnética Nuclear (RMN). 4. Espectroscopia Mössbauer para Fe(II) e Fe(III). 	5h	0h	0h	0h	5h
Total	60h	0h	0h	0h	60h

Teórica (T); Prática (P); Estudo Dirigido (ED); Projeto (Pj); Total (To);

Planejamento pedagógico	
Carga horária	Itens
Teórica	Apresentação de conteúdo oral e escrito em quadro convencional; Resolução de exercícios; seminários apresentados pelos alunos; e Apresentação de conteúdo oral e escrito com o apoio de equipamento (computador, projetor, quadro-digital, TV, outros)
Prática	<i>Não definidos</i>
Estudo Dirigido	Resolução de problemas

A autenticidade deste documento pode ser conferida no site <https://siadoc.ufv.br/validar-documento> com o código: DDSU.ETII.46PE

Projeto	<i>Não definidos</i>
Recursos auxiliares	<i>Não definidos</i>

QUI 323 - Química Bioinorgânica**Bibliografias básicas**

Descrição	Exemplares
HUHEEY, J. E.; KEITER, E. A.; KEITER, R. L. Inorganic chemistry : principles of structure and reactivity. 3ª e 4ª edições. New York: Harper Collins, 1983 e 1993. ISBN 006042995X.	8
TOMA, H. E. Química Bioinorgânica e Ambiental. São Paulo: Blucher, 2015. ISBN 9788521209010. Ebook disponível na biblioteca virtual.	0
SPRINGERLINK (ONLINE SERVICE). Bioinorganic Chemistry. 1ª edição. Springer, 1990. ISBN 9783540466680. Ebook disponível na biblioteca virtual.	0

Bibliografias complementares

Descrição	Exemplares
BERTINI I.; GRAY H. B.; LIPPARD S. J.; VALENTINE J. S. Bioinorganic Chemistry, Mill Valley: University Science Books, 1994.	0
HOUSECROFT, C. E.; SHARPE, A. G. Química inorgânica : volumes 1 e 2. Rio de Janeiro: LTC, 2013. ISBN 9788521623274.	14
SHRIVER, D. F.; ATKINS, P. W. Química inorgânica. 4ª edição. Porto Alegre: Bookman, 2008. ISBN 9788577801992.	14
LEE, J. D. Química inorgânica não tão concisa: J. D. Lee ; São Paulo: Blucher, 1999. ISBN 9788521201762.	19
BARROS, H. L. C. Química inorgânica : uma introdução. Belo Horizonte: UFMG , 1995. ISBN 8570410514.	3
MIESSLER, G. L.; FISCHER, P. J.; TARR D. A. Química inorgânica. 5ª edição. Pearson, 2008. ISBN 9788543000299. Ebook disponível na biblioteca virtual.	0
SPRINGERLINK (ONLINE SERVICE). Bioinorganic Chemistry: Trace Element Evolution from anaerobes to aerobes. 1ª edição. Springer, 1998. ISBN 9783540695950. Ebook disponível na biblioteca virtual.	0