
Ano Letivo 2019-20

Unidade Curricular QUÍMICA INORGÂNICA FARMACÊUTICA

Cursos CIÊNCIAS FARMACÊUTICAS (Mestrado Integrado)

Unidade Orgânica Faculdade de Ciências e Tecnologia

Código da Unidade Curricular 14881200

Área Científica QUÍMICA

Sigla

Línguas de Aprendizagem
Português

Modalidade de ensino
Presencial

Docente Responsável João Paulo Gil Lourenço

DOCENTE	TIPO DE AULA	TURMAS	TOTAL HORAS DE CONTACTO (*)
João Paulo Gil Lourenço	PL; T; TP	T1; TP1; TP2; PL1; PL2; PL3	28T; 42TP; 27PL

* Para turmas lecionadas conjuntamente, apenas é contabilizada a carga horária de uma delas.

ANO	PERÍODO DE FUNCIONAMENTO*	HORAS DE CONTACTO	HORAS TOTAIS DE TRABALHO	ECTS
2º	S2	28T; 21TP; 9PL	168	6

* A-Anual;S-Semestral;Q-Quadrimestral;T-Trimestral

Precedências

Sem precedências

Conhecimentos Prévios recomendados

Conhecimentos ao nível dos ministrados na disciplina de Teoria da Ligação Química.

Objetivos de aprendizagem (conhecimentos, aptidões e competências)

Nesta disciplina os alunos devem desenvolver capacidades de compreensão da ligação química em compostos de coordenação e ser capazes de relacionar as suas propriedades com a reactividade. Com base nos conceitos de estrutura e reactividade devem também compreender o modo de actuação a nível molecular de diversos fármacos baseados em complexos de metais de transição, tendo em vista não só o tratamento ou diagnóstico mas também o desenvolvimento de estratégias conducentes à preparação de novos complexos com potencial actividade terapêutica.

Conteúdos programáticos

Âmbito e interligação com a medicina

Complexos: Definição, números de coordenação, geometrias e isomerismo.

Ligação química nos compostos de coordenação: Teoria do campo de ligandos para geometrias representativas e modelo da sobreposição angular.

Espectroscopia electrónica de compostos de coordenação.

Reacções químicas de compostos de coordenação: Reacções de substituição e redox. Mecanismos de substituição de activação associativa e dissociativa, catálise ácida e básica. Mecanismos de reacções de redox de esfera interna e esfera externa.

Compostos de coordenação em imagiologia. Agentes de contraste para RMN e RX. Agentes para imagiologia PET e SPECT. Síntese, estrutura e biodistribuição.

Compostos de coordenação na terapêutica antitumoral: Complexos de platina de primeira e segunda gerações. Outros complexos de metais de transição, com potencial actividade.

Terapêutica por quelação.

Terapêutica com radiação: Emissores alfa e beta, Radioimunoterapia. Radiosensibilizadores.

Demonstração da coerência dos conteúdos programáticos com os objetivos de aprendizagem da unidade curricular

A actuação ao nível molecular de fármacos contendo metais de transição está relacionada com a natureza da ligação química que se estabelece entre o metal os diversos átomos ou moléculas que constituem os ligandos, incluindo moléculas biológicas. É assim de elevada importância conhecer a natureza da ligação química em complexos de metais de transição e de que modo está relacionada com a reactividade em diversos tipos de reacções químicas. Os primeiros tópicos dos conteúdos programáticos são dedicados a este estudo.

Com base nestes conhecimentos são apresentadas algumas áreas de aplicação de complexos de metais de transição. Na discussão destas aplicações são justificados os efeitos benéficos ou adversos com base na actuação ao nível molecular (sempre que para tal existem indícios). São não apenas apresentados fármacos aprovados mas também estudos em curso e discutidas estratégias de desenvolvimento de novos fármacos baseadas em relações estrutura-actividade.

Metodologias de ensino (avaliação incluída)

As aulas teóricas são expositivas, incluindo exemplos ilustrativos de aplicação dos conceitos. Os alunos são incentivados a participar activamente nestas aulas, colocando questões, fazendo comentários e discutindo os temas abordados.

São disponibilizados aos alunos fichas de exercícios que ilustram os conceitos abordados nas aulas teóricas. Nas aulas teórico-práticas são resolvidos alguns destes exercícios de modo a que abranjam todos os conceitos leccionados. Os alunos são encorajados a resolver por si próprios os exercícios.

A frequência da componente laboratorial é obrigatória e terá um peso de 15 % na nota final, para todos os momentos de avaliação e estatutos.

São realizados os exames constantes no regulamento de avaliação da Universidade do Algarve, bem como duas frequências podendo, sem prejuízo do ponto anterior, ser obtida aprovação por frequência ou por exame. Só poderá ser obtida aprovação na disciplina se a nota a cada uma das componentes for igual ou superior a 9,5 valores.

Demonstração da coerência das metodologias de ensino com os objetivos de aprendizagem da unidade curricular

As aulas teóricas são expositivas mas permitem a discussão dos diversos temas abordados, encorajando-se a participação dos alunos. Nas aulas teórico-práticas, a resolução pelos próprios alunos das diversas questões em análise (com o devido acompanhamento do docente) permite o reconhecimento do nível de conhecimentos adquiridos levando assim a que não exista a simples memorização de problemas que podem não reflectir a generalidade dos casos. Uma melhor compreensão dos conceitos básicos que estão na origem da actividade ou não actividade de diversos complexos deverá ser fundamental para a interpretação de novos resultados bem como para o desenvolvimento de novas estratégias na preparação de novos fármacos deste tipo.

Bibliografia principal

- * Inorganic Chemistry, G. L. Miessler, D. A. Tarr, 2nd Ed., Prentice-Hall Inc., New Jersey, 1999.
- * Medicinal applications of coordination chemistry, C. Jones, Royal Society of Chemistry, 2007.
- * Uses of inorganic chemistry in medicine, N. Farrell (Ed), Royal Society of Chemistry, 1999.
- * Medicinal inorganic chemistry, J.L. Sessler, R. Doctrow, T.J. McMurry, S.J. Lippard (Eds), Oxford University Press, 2005.
- * Principles of bioinorganic chemistry, S. J. Lippard, J. M. Berg, University Science Books, Mill Valley, California, 1994.

Academic Year 2019-20

Course unit PHARMACEUTICAL INORGANIC CHEMISTRY

Courses PHARMACEUTICAL SCIENCES (Integrated Master's)

Faculty / School FACULTY OF SCIENCES AND TECHNOLOGY

Main Scientific Area QUÍMICA

Acronym

Language of instruction Portuguese

Teaching/Learning modality Presential teaching/learning

Coordinating teacher João Paulo Gil Lourenço

Teaching staff	Type	Classes	Hours (*)
João Paulo Gil Lourenço	PL; T; TP	T1; TP1; TP2; PL1; PL2; PL3	28T; 42TP; 27PL

* For classes taught jointly, it is only accounted the workload of one.

Contact hours

T	TP	PL	TC	S	E	OT	O	Total
28	21	9	0	0	0	0	0	168

T - Theoretical; TP - Theoretical and practical ; PL - Practical and laboratorial; TC - Field Work; S - Seminar; E - Training; OT - Tutorial; O - Other

Pre-requisites

no pre-requisites

Prior knowledge and skills

Fundamentals of chemical bonding

The students intended learning outcomes (knowledge, skills and competences)

In this course students should understand the chemical bonding in coordination compounds and be able to correlate their properties with the reactivity. Starting from the concepts of structure and reactivity, students should also comprehend the mechanism of action at molecular level (when known) of different drugs based in transition metals not only for established therapeutics or diagnosis but also with the aim of developing new strategies for the preparation of new complexes with potential activity.

Syllabus

Inorganic chemistry and medicine.

Complexes: Definition, coordination numbers, geometry and isomerism.

Chemical bonding in coordination compounds: Ligand field theory for selected geometries and angular overlap model.

Electronic spectroscopy of coordination compounds.

Chemical reaction of coordination compounds: substitution and redox reactions. Reaction mechanisms for the substitution reactions. Associative and dissociative activation. Acid and base catalysis. Inner-sphere and outer sphere redox mechanisms.

Coordination compounds in medical imaging. Contrast agents for NMR and RX. Agents for PET and SPECT imaging. Synthesis, structure and biodistribution.

Coordination compounds in cancer therapeutics: Complexes of platinum of the first and second generations. Other transition metal complexes with potential activity.

Chelating therapy.

Radiation therapeutics: radiotherapy, alpha and beta emitters. Radioimmunotherapy. Radiosensibilizers.

Demonstration of the syllabus coherence with the curricular unit's learning objectives

The mode of action at molecular level of drugs based in transition metals is related with the nature of the chemical bonding between the metal and the various ligand atoms or molecules, including biological molecules. Thus is of great importance to know the nature of the chemical bonding in metal complexes and how is this related with the reactivity in different types of chemical reactions. This is the subject of the first topics of the program.

Selected areas of application of metal complexes are discussed. For each one, the beneficial or detrimental effects are mode of action at the molecular level (when it is know). Along with drugs already approved for clinical use, also drugs under study and strategies to develop new compounds are discussed.

Teaching methodologies (including evaluation)

Theoretical lectures include examples of application of concepts. Students are encouraged to participate actively in these lectures, discussing the themes that are being studied.

Sets of exercises (including real applications), that cover the topics of the theoretical lectures, are primary solved by the students with the adequate guidance of the professor.

Attending the laboratory classes is obligatory.

Assessment is made by a final exam or by two written tests during the semester. The final mark will be obtained considering 15% of the laboratory assement and 85% of the mark obtained by final exame or written tests. Each component should be equal or higher than 9.5 points.

Demonstration of the coherence between the teaching methodologies and the learning outcomes

Theoretical concepts are transmitted in an expository way, however, by encouraging the students to express their difficulties and requesting answers to various questions, it is possible to evaluate the learning progress and to do a fine-tuning of the concept progression.

Students are provided with a set of exercises that cover all the topics studied in the theoretical lectures. Students are encouraged to solve by themselves the exercises (with the proper guidance of the professor) and this strategy allow the students to recognise their level of concept knowledge aiming at the ability to apply to new situations, rather than a simple memorising process. A better understanding of the basic concepts that control the activity of different complexes should be fundamental to the interpretation of new results and to the development of new strategies for the preparation of new drugs.

Main Bibliography

- * Inorganic Chemistry, G. L. Miessler, D. A. Tarr, 2nd Ed., Prentice-Hall Inc., New Jersey, 1999.
- * Medicinal applications of coordination chemistry, C. Jones, Royal Society of Chemistry, 2007.
- * Uses of inorganic chemistry in medicine, N. Farrell (Ed), Royal Society of Chemistry, 1999.
- * Medicinal inorganic chemistry, J.L. Sessler, R. Doctrow, T.J. McMurry, S.J. Lipard (Eds), Oxford University Press, 2005.
- * Principles of bioinorganic chemistry, S. J. Lippard, J. M. Berg, University Science Books, Mill Valley, California, 1994.