

**ATENÇÃO: PARA ESSE CURSO É ACONSELHÁVEL O USO DE SEU COMPUTADOR PESSOAL PARA INSTALAÇÃO DOS PROGRAMAS QUE SERÃO UTILIZADOS DURANTES AS AULAS**

**CURSO:** RMN EM QUÍMICA MEDICINAL

**NÚMERO DE CRÉDITOS:** 02

**PROFESSOR:** Eurico J. Cabrita (Fac. Ciências Tecnologia – Univ. NOVA Lisboa, Portugal)

**LIMITE DE VAGAS:** não há

**PRÉ-REQUISITO RECOMENDADO:** INTRODUÇÃO À DETERMINAÇÃO ESTRUTURAL POR RMN – UMA ABORDAGEM NÃO-MATEMÁTICA

**OBJETIVOS:** apresentar as bases da aplicação da RMN num contexto de desenvolvimento de fármacos, quer do ponto de vista da pequena molécula (ligante), quer do ponto de vista do alvo biológico.

## **PROGRAMA**

### **1. Fundamentos da RMN aplicados à química medicinal**

1.1 Revisão de conceitos teóricos (do spin ao espectro) e dos principais parâmetros da RMN;

1.2 Relaxação e equações do Bloch e efeito nuclear de Overhauser;

1.3 Breve descrição da aplicação da RMN em análise farmacêutica;

### **2. Exemplos de aplicação da RMN na análise estrutural de pequenas moléculas**

2.1 Exemplos de aplicação de uma estratégia integrada utilizando experiências multidimensionais de RMN (COSY, HMQC, HMBC) para elucidação estrutural.

### **3. A RMN como ferramenta integrada para a descoberta e desenvolvimento de fármacos**

3.1 Desenvolvimento de fármacos baseado em análise de farmacóforos ou alvos (pharmacophore vs receptor drug design);

3.2 Descrição cinética do processo de complexação e relação com os parâmetros de RMN (permuta química);

3.3 Introdução ao RMN biomolecular – a experiência de <sup>15</sup>N HSQC;

3.4 Técnicas para observação do ligante (STD-NMR, waterlogsy, Difusão, TrNOE) e técnicas de observação do alvo)

### **4. Exemplos de aplicação da RMN para mapeamento de interações proteína-ligante**

4.1 A experiência de STD-RMN;

4.2 Mapeamento de interações proteína-ligante por análise de perturbação de deslocamentos químicos da proteína.

## Bibliografia

1. Keeler, J.; *Understanding NMR Spectroscopy*, Wiley, New York, 2010.
2. T. D. W. Claridge, *High-Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry*, Pergamon (Tetrahedron Organic Chemistry Series, Volume 19)