

**Redação Selecionada e publicada pela
Olimpíada de Química SP-2012**

Autor: Henrique Magri Marçon

Série: segunda (2011) do Ensino Médio

Profs.: Rubens Conilho Jr; Letícia Montes Faustino e Rodrigo Biascaia

Colégio: Etapa

Cidade: Valinhos, SP

Química, uma ciência contemporânea

A química normalmente é mal vista devido às gorduras trans, os venenos, e a frase clássica: “não coma isso, tem muita química”, pois os que assim pensam não reconhecem seu grandioso e importantíssimo papel na vida atual. Afinal, como seria possível uma ciência tão antiga, que vem desde os tempos de Lavoisier, Priestley e Scheele, contribuir significativamente para mais alterações na ciência contemporânea? Esta ciência está em todo lugar, desde remédios, passando pela construção, produção agrícola, combustíveis, tratamento de água e chegando até em combustíveis.

Uma das áreas que contribuiu muito positivamente é a dos plásticos. Eles são apenas uma classe do grupo dos polímeros. Ao alterarmos seus meios de produção, temos componentes melhores para cada tipo de aplicação. Por exemplo, o polietileno de alta densidade (HDPE), que é usado em garrafas plásticas, e no polietileno de baixa densidade (LDPE), que constitui as sacolas de supermercado¹.

Plásticos são de grande utilidade no cotidiano: eles protegem alimentos, transportam água em encanamentos e garrafas. Porém o processo de obtenção ainda pode se tornar mais verde e poluir menos o ambiente se ampliarmos o uso da reciclagem e seu rendimento.

Outra aplicação da química é o tratamento de água. A partir de análises químicas quantitativas, por exemplo, em um espectrofotômetro pode-se utilizar a lei de Lambert-Beer para calcular a concentração dos íons presentes em uma amostra da água a ser tratada. É possível resumir esse processo nas seguintes etapas²:

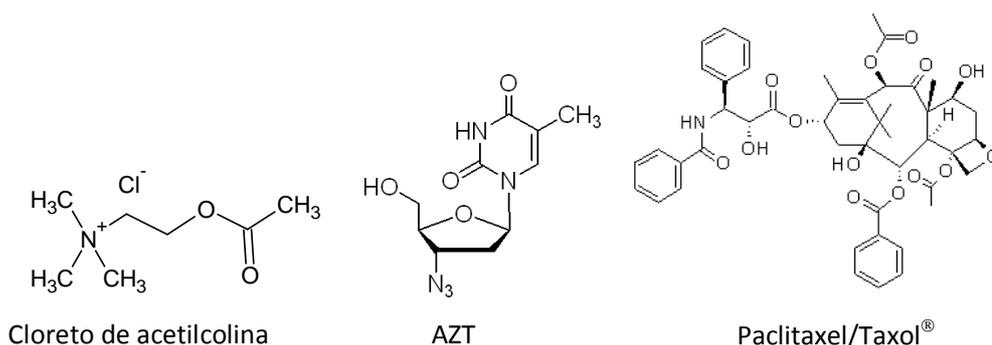
- Remoção de partículas sólidas, que é feita com coagulação por adição de FeCl_3 e floculação com $\text{Al}_2(\text{SO}_4)_3$;
- Destruição de microorganismos presentes através da cloração;
- Fluoretação para diminuir a incidência de cáries na população.

Outra grande área de destaque desta ciência é a dos fármacos e seus similares, já que toda vez que se toma um remédio há um indústria e muitas pesquisas para

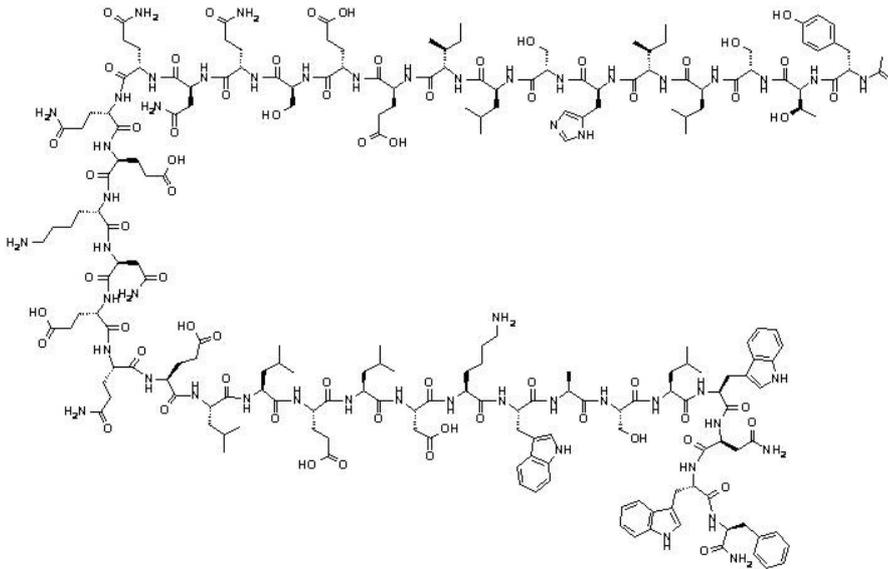
aquele comprimido poder chegar às mãos. Dessa forma, foi possível aumentar a longevidade e melhorar muito a qualidade de vida humana.

Esses fármacos podem ser de vários tipos, entre eles os psicotrópicos, farmacodinâmicos, quimioterapêuticos, mas não há uma classificação oficial, uma vez que esses conceitos variam de acordo com a bibliografia.

Podemos citar alguns desses fármacos, como o anti-HIV conhecido por AZT, o anticâncer paclitaxel/taxol[®] e o vasodilatador cloreto de acetilcolina que além de ser sintetizado em laboratório, também é produzido pelo corpo humana como neurotransmissor. Suas estruturas³, respectivamente, são mostradas abaixo.



Os compostos citados anteriormente possuem certo grau de complexidade em suas estruturas e, para podermos comprá-los comercialmente foi necessário o desenvolvimento da síntese industrial destes. É possível até a exigência de fármacos muito complexos como o Fuzeon. “Esse fármaco, também conhecido como T-20, pentafusida e enfuvirtida, é um peptídeo com fórmula molecular e massa molar de $C_{204}H_{301}N_{51}O_{64}$ e 4492 gramas por mol [em um composto tão grande é necessário considerar a influência de isótopos], [...]. A preparação do Fuzeon envolve 106 etapas, sendo o fármaco mais complexo até hoje comercializado.” (adaptado do livro “Estudo da síntese orgânica baseado em substâncias bioativas” de Marcus Vinícius Nora de Souza). A estrutura do Fuzeon é mostrada abaixo:



Para podermos criar e aperfeiçoar todos os medicamentos atuais, é necessário um entendimento do mecanismo de funcionamento destes. Em geral, os fármacos podem ser interpretados como inibidores da ação de proteínas. Estas macromoléculas possuem sítios ativos que as tornam altamente específicas para seus substratos, os quais podem ser substituídos por fármacos para bloquear ações indesejadas das proteínas.

A estrutura delas é muito complexa e por isso não é fácil encontrar o sítio ativo e conseqüentemente as moléculas bioativas. Ao identificá-las é necessário analisar os ligantes para determinar as possíveis interações com o fármaco para, assim, ser possível uma triagem virtual de compostos os quais suprirão tais qualificações. Outro problema frequente é que um mesmo substrato pode interagir com várias proteínas diferentes e inibir uma ação benéfica ao corpo, o que causa efeitos colaterais.

Mas de que adiantaria um fármaco se ele demorasse um longo período para agir e fossem necessárias grandes quantidades para surtir efeito? Por isso outro fator de vital importância para que se diminuam os efeitos colaterais é o estudo da cinética farmacológica e da seletividade da proteína que será inibida pelo medicamento. Essa inibição pode ser classificada em competitiva, incompetitiva e não-competitiva, as quais estão esquematizadas abaixo.



“Um exemplo de adaptações no processo de desenvolvimento de um fármaco é a cimetidina. Esse passou por várias etapas: iniciou-se com um análogo da histamina, que, por causar efeitos indesejados; alterou-se então, sua estrutura e chegou-se ao composto burimamida, que não pode ser ingerido oralmente. Mais alterações na estrutura molecular foram feitas, até que se chegou a outro precursor fármaco, a metiamida. Esta última tinha um sério problema: diminuía as células brancas do sangue tornando o paciente mais suscetível a infecções. Por fim, com pequenas alterações conseguiu-se a cimetidina, que é mais eficiente e sem efeitos colaterais tão pronunciados” (Adaptado do livro “Organic Chemistry”, J. Clayden¹⁰).

Nota-se, assim, que na descoberta de novos fármacos e potencialização dos mesmos devem-se considerar fatores como seletividade, eficácia, toxicidade e afinidade para a otimização molecular. Pela modelagem molecular é possível prevermos alguns dos resultados e analisar as interações que o fármaco deve ter com o sítio ativo para identificarem-se novos promissores fármacos.

O grau de complexidade desta área, e de várias outras da química, oferece muitas oportunidades de melhorar ainda mais o mundo no qual vivemos. Estas adaptações abrangem desde o ser humano - através de sua qualidade de vida - até o meio onde ele vive - por meio da sustentabilidade. Por isso, mesmo já estando muito desenvolvida esta ciência, ela é inesgotável e fundamental para termos um mundo cada vez melhor!

Bibliografia:

1 – CALLISTER, W D Jr, *Ciência e engenharia de materiais: Uma introdução*. 8 ed. Rio de Janeiro: LTC, 2002. 533p.

2 - <http://site.sabesp.com.br/site/interna/Default.aspx?secaold=491> – acessado em 02/11/2011;

3 – SOUZA, M.V.N. *Estudo da síntese orgânica baseado em substâncias bioativas* Campinas: Editora Átomo, 2010. n.p.

4 – CONNORS, K. A., *Chemical Kinetics the study of reaction rate in solution*. Madison: VHC, 1990;

5 - <http://tti.itc.virginia.edu/~cmg/Demo/complnh.html> - acessado em 16/11/2011;

6 - http://www.scielo.br/scielo.php?pid=S0100-40422008000700034&script=sci_arttext – acessado em 16/11/2011;

7 - <http://tti.itc.virginia.edu/~cmg/Demo/nonclnh.html> - acessado em 16/11/2011;

8 -

<https://dspace.ist.utl.pt/bitstream/2295/101282/1/c:%5Cdocuments%20and%20settings%5Cadministrator%5Cmy%20documents%5Cquimica%20medicinal%5Cdocumentos%20colocados%20na%20pagina%20da%20cadeira%5Cqm2.pdf> – acessado 04/11/2011;

9 - http://www.injectaveis.com/classificacao_ft.html - acessado 04/11/2011;

10 – CLAYDEN, J.; GREEVES, N.; WARREN, S.; WOTHERS, P. *Organic Chemistry*. Oxford, 2001. 204-206p.