



Final

5 de Maio de 2007

Prova Teórica

Nome:

Escola:

A Química Medicinal é um ramo das Ciências Químicas que também abrange conhecimentos das Ciências Biológicas, Mediciniais e Farmacêuticas. Esta disciplina envolve a identificação e preparação de compostos biologicamente activos, bem como a avaliação das suas propriedades biológicas e estudos das suas relações estrutural/actividade.

Pergunta	Total
Radioisótopos	
Canibalismo químico	
Cogumelos: petisco ou veneno	
O arranjo espacial dos átomos	
Classificação teórica	
Classificação prática	
Classificação final	



Departamento
de
Química

Radioisótopos

A radioactividade de um elemento pode ser usada em medicina de duas formas diferentes: a) em diagnóstico, para possibilitar a visualização dos órgãos e/ou verificar o seu funcionamento/metabolismo e, b) em tratamentos, por exemplo, para destruir células cancerígenas.

A tiroxina (Fig.1) é uma hormona cuja função é estimular o metabolismo celular e que é produzida pela tiróide, glândula que regula o bom funcionamento do nosso organismo. Assim, a visualização desta glândula é essencial para diagnosticar irregularidades no seu funcionamento e, conseqüentemente, prevenir doenças. Como esta glândula acumula o iodo e o utiliza na síntese da tiroxina, se for administrado um composto contendo *iodo radioactivo*, o isótopo iodo-131, este acumula-se na tiróide e, ao emitir radiação, possibilita a visualização daquela. As quantidades necessárias para visualizar a glândula tiróide são muito baixas, contudo a administração de quantidades mais elevadas é usada no tratamento do hipertireoidismo. Esta doença é caracterizada pelo excesso de produção de tiroxina, que pode ser controlado pela administração de *iodo radioactivo* que destrói células da tiróide, diminuindo a produção da hormona.

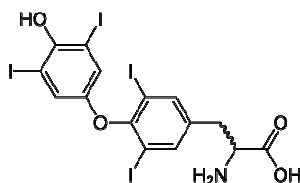


Figura 1

Cada elemento radioactivo desintegra-se a uma velocidade que lhe é característica. Para se acompanhar a duração (ou a vida) de qualquer elemento radioactivo é preciso estabelecer uma forma de comparação. Foi, assim, estabelecido o tempo de meia-vida, que é o tempo necessário para a actividade de um elemento radioactivo ser reduzida a metade da sua actividade inicial.

Vejamos o caso do iodo-131, utilizado para exames da tiróide, que possui um tempo de meia-vida de 8 dias. Isto significa que, decorridos 8 dias, a quantidade ingerida pelo paciente está reduzida a metade. Passados mais 8 dias, a quantidade existente será a metade desse valor, ou seja, $\frac{1}{4}$ da quantidade inicial e assim sucessivamente.

1 – Sabendo que o iodo tem número atómico 53 e tem 37 isótopos sendo o ^{127}I o isótopo que é estável, indique a constituição dos isótopos ^{127}I e ^{131}I , salientando as suas diferenças.

2 – Tendo em conta o tempo de meia-vida do iodo-131, indique o tempo necessário para que os 100 mg sejam reduzidas a menos de 1 mg.

Canibalismo químico

O meio fortemente ácido no estômago é necessário para o bom funcionamento do nosso corpo. Mas uma excessiva produção de ácido causa, numa fase inicial, indisposição e poderá provocar gastrite ou mesmo úlceras, que são lesões localizadas nas paredes do estômago, resultantes da sua destruição. A causa do aparecimento das úlceras é sempre os danos provocados pelo ácido clorídrico e pelas enzimas produzidas no estômago. Normalmente há mecanismos protectores das paredes do estômago, contudo se essa protecção falha, os danos surgem na parede do estômago, que é digerida pelas enzimas, como se fosse um alimento.



Alka-Seltzer[®] é o nome do medicamento produzido pela Bayer, que é muito usado como anti-ácido. Cada comprimido de Alka-Seltzer[®] contém 1,0 g de hidrogenocarbonato de sódio (NaHCO₃), 0,3 g de hidrogenocarbonato de potássio (KHCO₃) e 0,8 g de ácido cítrico (Fig.2). No entanto, há muitos outros medicamentos que são usados no controlo da acidez do estômago, cuja diferença está, principalmente, na base que é usada como *princípio activo*. Por exemplo, pessoas com problemas de hipertensão devem evitar o hidrogenocarbonato de sódio e podem tomar leite de magnésia Philips[®], que contém 0,8 g de hidróxido de magnésio (Mg(OH)₂) por comprimido ou o Di-Gel[®], que contém 0,8 g de hidróxido de alumínio (Al(OH)₃) também por comprimido. Quem apresente problemas de descalcificação pode optar por tomar Tiralac[®], que contém 0,6 g de carbonato de cálcio (CaCO₃) por comprimido e, assim, resolver dois problemas com um só medicamento.

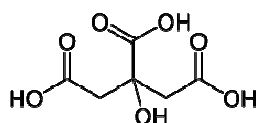
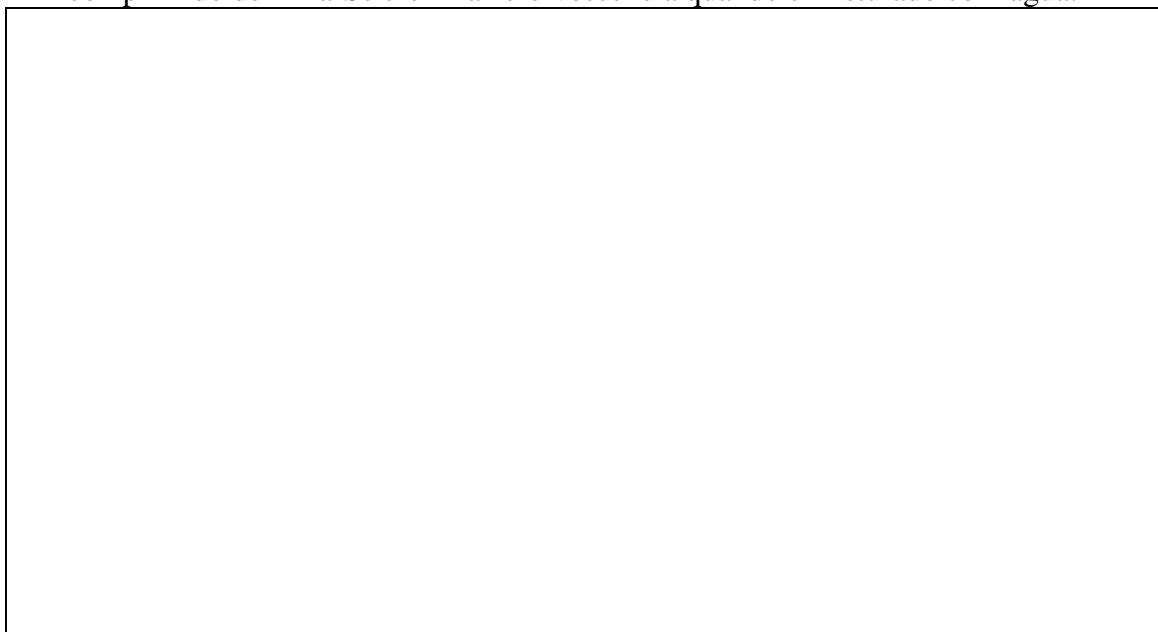


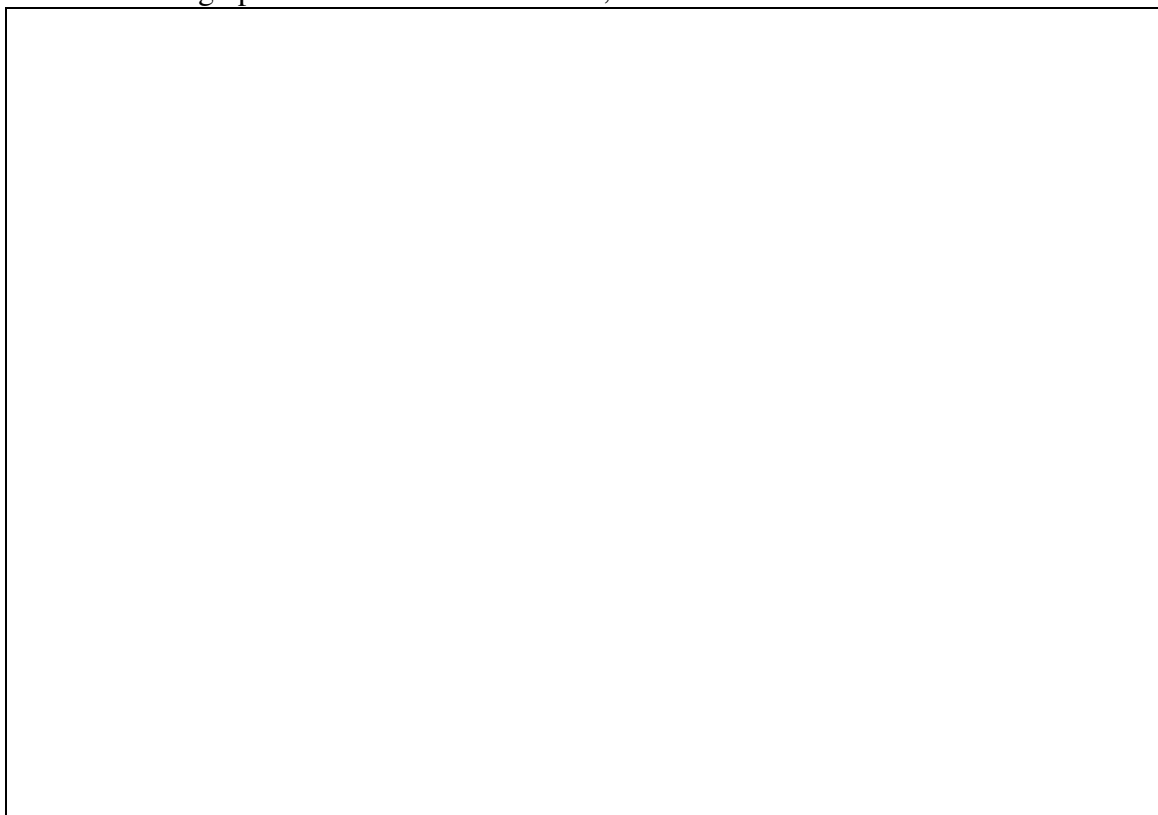
Figura 2

1 – Escreva as equações químicas acertadas das reacções dos *princípios activos*, de cada um dos medicamentos mencionados, com o ácido clorídrico existente no estômago.

2 – Explique, por meio de equações químicas acertadas a razão pela qual o comprimido de Alka-Seltzer[®] faz efervescência quando é misturado com água.



3 – Se a concentração de ácido clorídrico no estômago for de $5,3 \times 10^{-2} \text{ mol/dm}^3$, quantos comprimidos de Tiralac[®] são necessários para elevar o pH ($\text{pH} = -\log[\text{H}^+]$) do estômago para o seu valor normal de 2,3.



Nota: $\text{Ar}(\text{C}) = 12,011$
 $\text{Ar}(\text{Ca}) = 40,08$
 $\text{Ar}(\text{O}) = 15,999$

Cogumelos: petisco ou veneno

A *Amanita muscaria* (Fig.3) é um cogumelo de aparência inocente e aspecto apetitoso. Contudo, quando ingerido pelo homem ou animais domésticos, o cogumelo é tóxico. Dependendo da quantidade ingerida são induzidas alterações no sistema nervoso: descoordenação motora, alucinações, crises de euforia ou depressão intensa. Isto é devido à presença de um composto químico, a muscarina (Fig.3 – composto I). A atropina (Fig.3 – composto II), composto isolado da *Atropa belladonna*, é usado como antídoto e, normalmente, é administrada na forma de sal [solução de sulfato de atropina ($C_{17}H_{23}NO_3$) $_2 \cdot H_2SO_4$] (Fig.3). A dose usual de atropina administrada deve ser de 0,5 mg de cinco em cinco minutos até um máximo de 3 mg.

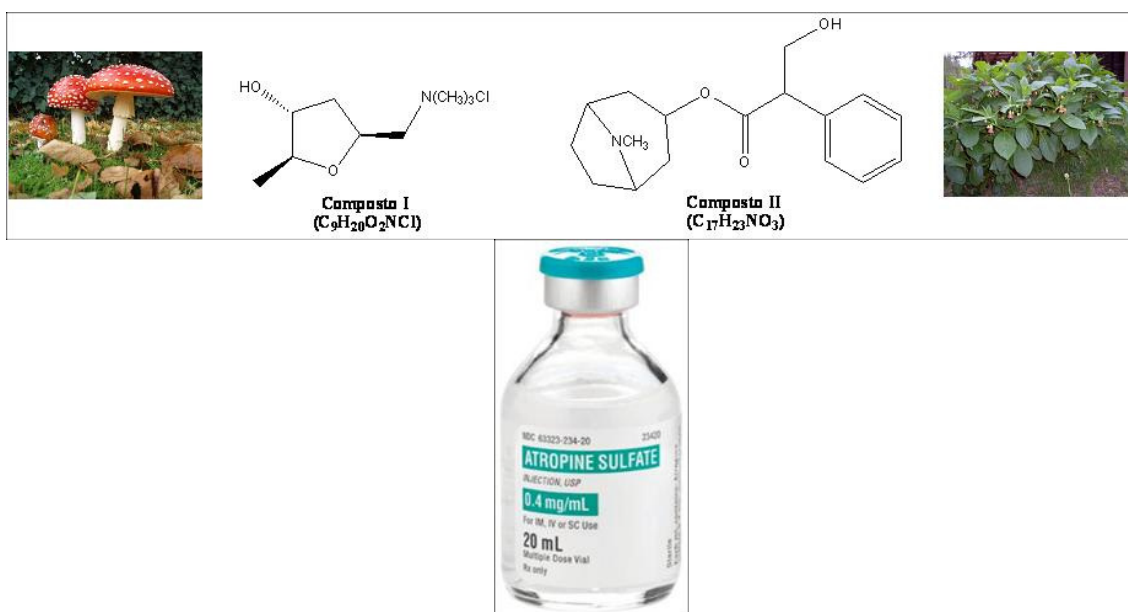


Figura 3

1 – Indique a quantidade de sulfato de atropina necessária, para fornecer 3 mg de atropina.

2 – Indique o volume de solução que deve ser administrada, num caso de intoxicação com muscarina (ver rótulo do frasco).



Nota: $\text{Ar}(\text{C}) = 12,011$

$\text{Ar}(\text{H}) = 1,008$

$\text{Ar}(\text{O}) = 15,999$

$\text{Ar}(\text{N}) = 14,007$

$\text{Ar}(\text{S}) = 32,066$

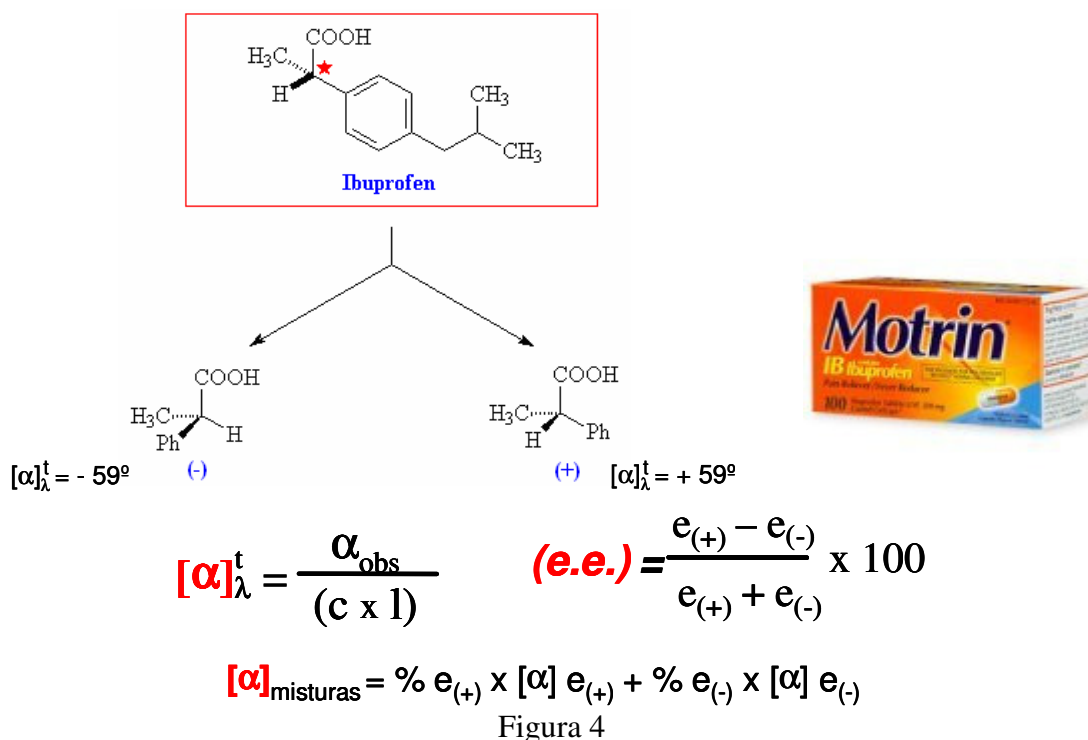
O arranjo espacial dos átomos

“Chamo quiral a qualquer figura geométrica ou grupo de pontos, ou digo deles que têm quiralidade se a respectiva imagem num espelho plano, realizada mentalmente, não puder ser levada a coincidir com a própria figura”

Lord Kelvin, 1893

As moléculas que diferem no arranjo espacial em torno de um átomo de carbono quiral têm uma propriedade física que as distingue, a actividade óptica, e designam-se por enantiómeros. A propriedade física que caracteriza cada um dos enantiómeros é a sua rotação específica $[\alpha]$ (Fig.4) e resulta da rotação do plano da luz linearmente polarizada. À rotação no sentido dos ponteiros do relógio atribui-se o sinal (+) e, no sentido inverso, o sinal (-). Assim sendo, numa molécula quiral temos o enantiómero $e_{(+)}$ e o $e_{(-)}$, cujos valores da rotação específica são iguais em módulo e diferem no sentido da rotação. Misturas que apresentam iguais quantidades de um par de enantiómeros, têm rotação específica igual a zero e designam-se por misturas racémicas.

O Ibuprofen (Fig.4) é um composto com um centro quiral e só o enantiómero $e_{(+)}$ tem actividade analgésica e anti-inflamatória. No entanto, na formulação do conhecido medicamento Motrin[®] aparece a indicação de que cada comprimido contém 400 mg de (+)/(-)-ibuprofen, ou seja, este medicamento é vendido como uma mistura racémica [50 % de (+)-ibuprofen e 50 % de (-)-ibuprofen], logo apresenta menor quantidade de princípio activo. Neste caso, a venda da mistura racémica não causa problemas, porque o (-)-ibuprofen não é tóxico. Mas, por vezes, um dos enantiómeros é benéfico e o outro é tóxico. Assim, para evitar falsificações e/ou efeitos secundários nos medicamentos, existe uma norma que obriga a que um dado medicamento tenha uma quantidade mínima do enantiómero activo, que é dada pelo excesso enantiomérico (e.e.) (Fig.4). Isto é, um medicamento não pode ser vendido se tiver uma percentagem do enantiómero activo inferior ao excesso enantiomérico recomendado.



1 – Desenvolvimentos recentes possibilitaram a descoberta de um método de síntese que possibilita a obtenção de uma mistura de ibuprofen com uma rotação específica de $+44,2^\circ$. Indique qual a composição enantiomérica da mistura obtida por este método.

2 – Se o excesso enantiomérico (e.e.) necessário para o composto poder ser comercializado como medicamento for de 95%, acha que o produto obtido em 1 poderia ser usado como medicamento?

Porque:.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....