

# UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID

## FACULTAD DE FARMACIA



### PROGRAMA DE

## QUÍMICA FARMACEÚTICA I

**3 Créditos Teóricos**

**2 Créditos Prácticos**

### DEPARTAMENTO DE QUÍMICA ORGÁNICA Y FARMACÉUTICA

PLAN DE ESTUDIOS 2000

**TEMA 9.-** Obtención de compuestos enantioméricamente puros. Resolución de racémicos. Utilización de sustratos quirales. Auxiliares quirales. Reactivos quirales. Catalizadores quirales. Uso de enzimas.

**TEMA 10.-** Síntesis de péptidos y peptidomiméticos.

**TEMA 11.-** Síntesis combinatoria. Ejemplos de síntesis de bibliotecas de fármacos en fase sólida.

### BIBLIOGRAFÍA

- \* Introducción a la Química Farmacéutica. C. Avendaño (ed.), Interamericana-McGraw-Hill, 20 ed., 2001.
- \* The Organic Chemistry of Drug Design and Drug Action. R.B. Silverman, Academic Press, 1992.
- \* Ejercicios de Química Farmacéutica. C. Avendaño, E.F. Llana, J.C. Menéndez, C. Pedregal, M.M. Söllhuber. Interamericana. Mc Graw-Hill, 1997.

### PROGRAMA DE PRÁCTICAS

- 1.- Determinación experimental del valor de log P y log D en fármacos.
- 2.- Estudio del equilibrio conformacional de la histamina por mecánica molecular. Aplicación a agoistas y antagonistas de histaminas.
- 3.- Seminarios de casos prácticos.

# PROGRAMA DE QUÍMICA FARMACEÚTICA

3 Créditos Teóricos  
2 Créditos Prácticos (prácticas y seminarios)  
TRONCAL - PRIMER CICLO - PLAN 2.000  
Segundo cuatrimestre - Segundo curso

## OBJETIVOS GÉNERALES

La asignatura de Química Farmacéutica I aborda aspectos generales del diseño y de la síntesis de fármacos.

## CRITERIOS DE EVALUACIÓN

La evaluación del grado de formación adquirido por el alumno se realizará mediante un examen final, así como por cualquier otra prueba que los profesores estimen oportuno llevar a cabo.

Se evaluarán los créditos prácticos experimentales a través del aprovechamiento del alumno, la calificación de la guía de prácticas y el examen de carácter teórico y/o práctico. Aprobar estos créditos es necesario para poder aprobar la asignatura.

La evaluación de los créditos prácticos de seminarios se hará conjuntamente con el examen de los créditos teóricos.

La asistencia a las clases teóricas y prácticas es obligatoria.

## PROGRAMA

**TEMA 1.-** Conceptos básicos en Química Farmacéutica. Nomenclatura de fármacos.

**TEMA 2.-** Evolución de los métodos de búsqueda y descubrimiento de fármacos. Metodologías tradicionales en la búsqueda de fármacos. El descubrimiento de un Acabeza de serie@ en la actualidad: modelado molecular y química combinatoria.

**TEMA 3.-** Optimización de un prototipo (I): Relaciones cualitativas estructura química-actividad biológica. Concepto de grupo farmacóforo. Modalidades del método de modificación molecular: simplificación del prototipo, unión de fragmentos activos, replicación moduladora. Criterios clásicos para la modificación sistemática de unidades estructurales. Modificación estructural de prototipos peptídicos: diseño de peptidomiméticos.

**TEMA 4.-** Optimización de un prototipo (II): Relaciones cuantitativas estructura química-actividad biológica (QSAR). Descriptores de las propiedades fisicoquímicas de los compuestos orgánicos: Parámetros hidrófobos, electrónicos y estéricos. Diseño de series de fármacos por métodos semicuantitativos. Diseño de series de exploración. QSAR 2D: método de Hansch y Fujita. Ejemplos de aplicación.

**TEMA 5.-** Modelado molecular. Métodos de estudio de la estructura tridimensional de los fármacos. Mecánica molecular y dinámica molecular. Mapeo de receptores. QSAR 3D.

**TEMA 6.-** Dianas farmacológicas: sus tipos. Tipos de enlace en la interacción fármaco-receptor. Importancia de aspectos estereoquímicos y conformacionales.

**TEMA 7.-** Metabolismo de fármacos. Metabolismo oxidativo. Mecanismo de las reacciones catalizadas por el citocromo P-450 y otras enzimas oxidativas. Principales tipos de sustratos susceptibles de metabolismo oxidativo. Reacciones de reducción e hidrólisis. Reacciones de fase II. Quimioselectividad y estereoselectividad de las reacciones metabólicas.

**TEMA 8.-** Profármacos y sus aplicaciones. Concepto de profármaco. Procedimientos para la construcción de profármacos sobre distintos grupos funcionales. Manipulación estructural orientada a resolver problemas de formulación farmacéutica y administración. Modulación del paso a través de membranas biológicas. Distribución selectiva. Modulación del metabolismo de fármacos.