

|   |                  |            |                  |                        |  |
|---|------------------|------------|------------------|------------------------|--|
| <b>UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR</b>   |                  |            |                  | 1/3                    |  |
| BAHIA BLANCA  |                  | ARGENTINA  |                  |                        |  |
| DEPARTAMENTO DE QUÍMICA   |                  |            |                  |                        |  |
| <b>PROGRAMA DE:</b><br>FUNDAMENTOS DE QUÍMICA MEDICINAL   |                  |            |                  | CÓDIGO: 6113           |  |
| HORAS DE CLASE  |                  |            |                  | AREA NRO: II           |  |
|   |                  |            |                  | PROFESOR/A RESPONSABLE |  |
|   |                  |            |                  | Dr. Cristian Vitale    |  |
| TEÓRICAS  |                  | PRÁCTICAS  |                  |                        |  |
| Por semana  | Por cuatrimestre | Por semana | Por cuatrimestre |                        |  |
| 4   | 70               | 2          | 30               |                        |  |
| ASIGNATURAS CORRELATIVAS PRECEDENTES  |                  |            |                  |                        |  |
| APROBADAS   |                  |            | CURSADAS         |                        |  |
| QUÍMICA ORGÁNICA B  |                  |            |                  |                        |  |
| <b>DESCRIPCIÓN / OBJETIVOS</b>  |                  |            |                  |                        |  |
| <p>La Química Medicinal o Química Farmacéutica es una ciencia altamente interdisciplinaria que combina la química orgánica con la bioquímica y la farmacología, entre otras. Es una de las consideradas ciencias farmacéuticas, que se encarga de estudiar y aplicar todos aquellos conceptos de la química orgánica tradicional al diseño, síntesis y desarrollo de moléculas con actividad biológica y fármacos con fines terapéuticos.</p> <p>Esta asignatura está destinada y adaptada a las necesidades curriculares de los estudiantes de Licenciatura en Química. El objetivo de la misma es introducir al alumno en los conocimientos básicos de la Química Orgánica Farmacéutica, integrando conocimientos ya adquiridos y ofreciendo un enfoque dinámico de esta rama de la ciencia, en especial en lo referente a la síntesis de fármacos. Se incluyen ejemplos y referencias de tipo histórico, sociológico y económico, que destacan la manera en la cual la química orgánica ha mejorado la calidad de vida y ha contribuido al desarrollo de la humanidad.</p> <p>Los conceptos fundamentales de la Química Orgánica Farmacéutica se presentan en forma gradual, bajo la consideración constante de la relación que tiene la Química Orgánica con los intereses del estudiante y la adquisición de nuevos conocimientos.</p> |                  |            |                  |                        |  |
| <b>PROGRAMA SINTÉTICO</b>   |                  |            |                  |                        |  |
| <b>TEMA 1:</b> Introducción a la Química Orgánica Farmacéutica.   |                  |            |                  |                        |  |
| <b>TEMA 2:</b> Estrategias en la búsqueda de fármacos.  |                  |            |                  |                        |  |
| <b>TEMA 3:</b> Principales compuestos orgánicos presentes en medicamentos.  |                  |            |                  |                        |  |
| <b>TEMA 4:</b> Metabolismo de fármacos.   |                  |            |                  |                        |  |
| <b>TEMA 5:</b> Diseño y síntesis de fármacos.   |                  |            |                  |                        |  |
| <b>TEMA 6:</b> Síntesis Orgánica y análisis retrosintético.   |                  |            |                  |                        |  |
| <b>TEMA 7:</b> Grupos protectores e inversión de polaridad.   |                  |            |                  |                        |  |
| <b>TEMA 8:</b> Desconexiones de sistemas monofuncionales.   |                  |            |                  |                        |  |
| <b>TEMA 9:</b> Desconexiones de sistemas difuncionales.   |                  |            |                  |                        |  |
| <b>TEMA 10:</b> Desconexión de enlaces múltiples C-C.   |                  |            |                  |                        |  |
| VIGENCIA AÑOS   | 2022             |            |                  |                        |  |

**PROGRAMA ANALÍTICO****TEMA 1:**

Historia de la Química Orgánica Farmacéutica. Compuestos naturales con poder terapéutico. Su aplicación en distintas etapas del desarrollo de la humanidad. Descubrimiento de nuevas drogas con y sin compuesto guía. Ejemplos.

**TEMA 2:**

Estrategias en la búsqueda de fármacos. Principales procedimientos: tradicional, serendipítico, cribado sistemático. Optimización de fármacos existentes. Diseño racional. Prodrogas, drogas duras y blandas. Etapas del desarrollo de un fármaco.

**TEMA 3:**

Principales compuestos orgánicos presentes en medicamentos. Nomenclatura de fármacos. Código de fabricante. Nombre comercial. Denominaciones comunes. Ejemplos.

**TEMA 4:**

Metabolismo de fármacos. Interacciones medicamento-receptor. Fuerzas intermoleculares. Aspectos estereoquímicos: isomería conformacional y configuracional. Agonismo y antagonismo. Relación estructura-actividad cualitativa (SAR) y cuantitativa (QSAR).

**TEMA 5:**

Diseño y síntesis de fármacos. Modificación molecular. Criterios clásicos: homologación y ramificación, introducción de grupos aromáticos o enlaces múltiples, apertura o cierre de anillos, isosterismo. Ejemplos: antihistamínicos, antiinflamatorios, corticosteroides, antibióticos, etc.

**TEMA 6:**

Clasificación y estrategias de síntesis: lineales y convergentes. Síntesis total. Retrosíntesis. Principios generales del método de desconexión. Interconversión de grupo funcional, equivalente sintético, sintón, molécula objetivo. Planificación de la síntesis. Aproximaciones basadas en: transformaciones, topología molecular, estereoquímica y grupos funcionales.

**TEMA 7:**

Papel de los grupos protectores en química orgánica. Concepto y características de un grupo protector. Protección de grupos hidroxilo, fenoles, grupos carbonilo, grupos carboxilo y de aminas. Grupos ortogonales.

**TEMA 8:**

Construcción del esqueleto hidrocarbonado. Sintones electrofílicos y nucleofílicos. Desconexiones de sistemas monofuncionales: alcoholes, aldehidos, cetonas y ácidos carboxílicos. Desconexiones anómalas: inversión de polaridad (umpolung).

**TEMA 9:**

Desconexiones de sistemas difuncionales: desconexiones inmediatas y desconexiones anómalas. Compuestos con esqueleto 1,2; 1,3; 1,4; 1,5; 1,6 dioxigenados. Ejemplos: compuestos  $\alpha$ -hidroxicarbonílicos,  $\alpha$ -hidroxiácidos, 1,2-dioles, compuestos  $\beta$ -hidroxi-carbonílicos y carbonílicos  $\alpha,\beta$ -insaturados, compuestos 1,3-, 1,4- y 1,6-dicarbonílicos, compuestos  $\gamma$ -hidroxicarbonílicos.

**TEMA 10:**

Desconexión de dobles enlaces C=C y de dobles enlaces conjugados (reacción de Wittig y otras, reacciones de eliminación, reacciones entre compuestos carbonílicos y acetilenos terminales). Desconexión de triples enlaces C $\equiv$ C (a partir de acetileno, de alquenos y de compuestos carbonílicos).

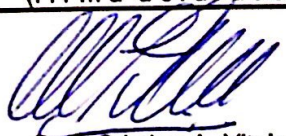
**PROGRAMA DE TRABAJOS PRÁCTICOS:** Guías de problemas de los temas 3, 4, 6-10.

**METODOLOGÍA DE LA ENSEÑANZA:** Las clases teóricas se desarrollarán de forma participativa, repasando conceptos de la química orgánica con un enfoque histórico y actualizado de la disciplina Química Medicinal. Así mismo, sobre esta base temática se introducirán conceptos de síntesis química y de análisis retrosintético.



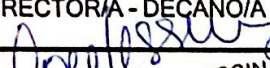
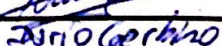
**FORMA DE EVALUACIÓN:** Se evaluarán los contenidos mediante dos parciales de promoción. Los alumnos que no promocionen rendirán por la modalidad de examen final, y aquellos que no alcancen el mínimo de aprobación rendirán un recuperatorio general.

**BIBLIOGRAFIA BÁSICA**

- 1.- Introducción a la Química Medicinal. L. Gavernet. Libros de Cátedra. 2021
2. - Introducción a la Química Orgánica Farmacéutica. M. Avendaño. McGraw-Hill, 1994.
- 3.- The Organic Chemistry of Drug Design and Drug Action. R. Silverman., M.W. Holladay, Acad. Press, 2014.
- 4.- An introduction to medicinal chemistry. Patrick, G. L. Oxford university press. 2013
- 5.- Pharmaceutical Chemistry. Vol. 1. Drug Synthesis. Roth and Kleemann. John Wiley, 1995.
- 6.- The Practice of Medicinal Chemistry. C. G. Wermuth, (Ed.). Acad. Press, 2011.
- 7.- The Logic of Chemicals Synthesis, E.J. Corey y X.M. Cheng, J. Wiley & Sons. 1995
- 8.- Síntesis Orgánica, J. Borrel Bilbao, J. Teixidó Closa y J.L. Falcó, Ed. Síntesis, 1999.

| AÑO  | PROFESORA RESPONSABLE (firma aclarada)  | AÑO | PROFESORA RESPONSABLE (firma aclarada) |
|------|---|-----|--|
| 2022 | <br>Prof. Cristian A. Vitale |     |  |

**V I S A D O**

|  |   |   |
|--|---|---|
| COORDINADORA AREA<br> | SECRETARÍA ACADÉMICA<br>M. ROSO<br> | DIRECTORA - DECANA/A<br> |
| FECHA:                | FECHA: DEPTO. DE QUÍMICA  | FECHA: Dra. PAULA V. MESSINA<br>DIRECTORA DECANA<br>DEPTO. DE QUÍMICA   |