

**FITXA IDENTIFICATIVA****Dades de l'Assignatura**

<b>Codi</b>	34100
<b>Nom</b>	Noves perspectives en disseny i síntesi de fàrmacs
<b>Cicle</b>	Grau
<b>Crèdits ECTS</b>	4.5
<b>Curs acadèmic</b>	2024 - 2025

**Titulació/titulacions**

<b>Titulació</b>	<b>Centre</b>	<b>Curs</b>	<b>Període</b>
1201 - Grau Farmàcia	Facultat de Farmàcia i Ciències de l'Alimentació	5	Primer quadrimestre

**Matèries**

<b>Titulació</b>	<b>Matèria</b>	<b>Caràcter</b>
1201 - Grau Farmàcia	33 - Nuevas Perspectivas en Diseño y Síntesis de Fármacos	Optativa

**Coordinació**

<b>Nom</b>	<b>Departament</b>
DIAZ OLTRA, SANTIAGO	325 - Química Orgànica

**RESUM**

L'assignatura *Noves Perspectives en Disseny i Síntesi de Fàrmacs* és una assignatura optativa de caràcter semestral i consta de 4.5 crèdits en el nou Pla d'Estudis del Grau en Farmàcia.

El seu objectiu primari és el disseny i coneixement dels mètodes més utilitzats en la síntesi de fàrmacs enantiomèricament purs. Per a això es requereix un coneixement profund de les diferents metodologies que condueixen a fàrmacs quirals. Aquestes idees bàsiques s'aplicaran a la síntesi industrial de fàrmacs en la qual es comentaran les metodologies més freqüents, els problemes que es presenten i les solucions a prendre. Un segon aspecte a considerar és la química de pèptids, molècules essencials tant des del punt de vista biològic com químic. La problemàtica en la síntesi de pèptids, així com l'ús de grups protectors són altres aspectes a considerar. Important en el context actual és la síntesi de pèptids en fase sòlida, així com el disseny per mètodes biològics d'aquests. Les característiques més significatives d'aquestes estratègies es comentaran amb cert detall. Dins d'este apartat s'estudiaran, mitjançant exemples significatius, les diferents estratègies en el disseny d'una síntesi de pèptids i peptidomimètics.



Una aproximació alternativa per a la síntesi de fàrmacs quirals és la que es basa en l'ús de metalls de transició com a catalitzadors. Encara que en l'assignatura no es pretén realitzar un estudi detallat dels principis de catàlisi facilitada per metalls de transició, es considera imprescindible l'exposició d'uns conceptes bàsics i l'estudi dels processos més significatius i actuals en el context de la catàlisi tant homogènia com heterogènia. D'aquesta manera, es comentaran tant el cicle catalític com els diferents tipus de reaccions d'acoblament creuat. Un altre aspecte important en la producció industrial de fàrmacs és el seu impacte mediambiental, per la qual cosa es veuran els principis bàsics de la denominada 'química verda' i s'analitzaran exemples pràctics de la seua implementació, així com la seua relació amb alguns dels Objectius de Desenvolupament Sostenible (ODS) de les Nacions Unides. El programa conclou amb alguns exemples pràctics de síntesi industrial de fàrmacs, els principis bàsics de modelització molecular i els mètodes espectroscòpics més actuals en l'anàlisi i disseny de fàrmacs.

## **CONEIXEMENTS PREVIS**

### **Relació amb altres assignatures de la mateixa titulació**

No heu especificat les restriccions de matrícula amb altres assignatures del pla d'estudis.

### **Altres tipus de requisits**

Coneixements bàsics de Química Orgànica i de Química Farmacèutica, tant a nivell teòric (estructura química, reactivitat de grups funcionals i metodologia sintètica) com pràctic (coneixement de les tècniques de laboratori de química orgànica). Coneixements bàsics de Bioquímica estructural.

### **1201 - Grau Farmàcia**

- Capacitat per a transmetre idees, analitzar problemes i resoldre'ls amb esperit crític, adquirint habilitats de treball en equip i assumint el lideratge quan siga apropiat.
- Capacitat per a obtenir i analitzar informació per afrontar problemes científics.
- Capacitat per a la formació continuada en el desenvolupament professional.
- Conèixer tècniques espectroscòpiques avançades i la seua aplicació en la investigació de fàrmacs i principis actius.
- Conèixer les característiques de la indústria farmacèutica i els aspectes més rellevants de la síntesi a gran escala.
- Saber plantejar seqüències sintètiques per a l'obtenció de determinats principis actius fent ús de la metodologia apresada.
- Poder dur a terme treballs de modelització molecular d'estructures orgàniques senzilles fent ús del programari apropiat.



Després de cursar l'assignatura en el doble vessant teòric-pràctic l'estudiant ha de ser capaç de:

- \* Utilitzar adequadament la terminologia científica bàsica relacionada amb la matèria.
- \* Manifestar comprensió i coneixement dels fets, conceptes, principis i teories essencials relacionats amb el contingut de l'assignatura.
- \* Saber aplicar aquests coneixements a la comprensió i solució de problemes de l'entorn quotidià.
- \* Exposar amb propietat treballs científics.
- \* Integrar els coneixements de síntesi de fàrmacs amb els adquirits en altres matèries.
- \* Avaluar, interpretar les diferents estratègies per sintetitzar fàrmacs.
- \* Reconèixer i aplicar el mètode científic.
- \* Comprendre i interpretar treballs científics relacionats amb la matèria.

## DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

### 1. Investigació i Desenvolupament de Processos en la Indústria Farmacèutica

1. Introducció: Característiques de la indústria farmacèutica actual. Mètodes d'estudi de les interaccions dels fàrmacs amb biomolècules (RMN, raigs X, mètodes computacionals,). 2. Síntesi asimètrica: Síntesi de fàrmacs enantiomèricament purs. Estratègies i exemples. 3. Reaccions d'acoblament creuat catalitzades per metalls. 4. Síntesi de pèptids i grups protectors: Disseny d'una síntesi. Anàlisi retrosintètic. Síntesi en fase homogènia i en fase heterogènia. 5. Química verda: Aspectes a considerar en la selecció d'una ruta sintètica. Equipament i seguretat en els processos. Reactius d'elecció i dissolvents. La presència d'aigua en els processos. Detecció en línia. 6. Desenvolupament de processos: De l'obtenció en xicoteta escala a la síntesi industrial. Exemples.

### 2. Pràctica en Aula d'Informàtica

Ferramentes informàtiques en el disseny de fàrmacs: Modelització molecular. Introducció i exemples. Ús de programari adequat.

**VOLUM DE TREBALL**

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Classes de teoria	28,00	100
Seminaris	7,00	100
Pràctiques en aula informàtica	6,00	100
Tutories reglades	2,00	100
<b>TOTAL</b>	<b>43,00</b>	

**METODOLOGIA DOCENT**

**Classes teòriques:** Els estudiants han d'adquirir els coneixements bàsics inclosos en el temari mitjançant el seu estudi individual i l'assistència a les classes teòriques. En estes classes el professor donarà una visió global del tema objecte d'estudi fent especial èmfasi en els aspectes més rellevants i en els d'especial complexitat. Per tal de fomentar la participació activa de l'estudiant el professor alternarà el mètode expositiu (llició magistral), l'estudi de casos i el plantejament de problemes. Per a l'estudi individual i la preparació dels temes amb profunditat, se'ls indicarà als estudiants la bibliografia adequada i es proporcionarà el necessari material de suport.

**Classes pràctiques:** Seminaris i Problemes: En elles es durà a terme fonamentalment la resolució dels problemes plantejats prèviament, que seran preparats i exposats pels propis estudiants. El nombre reduït d'alumnes per subgrup facilitarà que la seua participació siga més activa.

*També poden portar a terme activitats complementàries de tipus variat (debats, anàlisi de lectures, notes de premsa, ...) sobre temes d'actualitat relacionats amb la matèria, o s'aprofundirà en algun aspecte concret del temari de més difícil comprensió si així és requerit pels estudiants.*

**Tutories:** Les tutories s'organitzen en grups reduïts d'estudiants, segons el calendari establert (2 en total al llarg del curs). En elles, el professor avaluarà el procés d'aprenentatge dels estudiants d'una manera globalitzada. Per a això podrà plantejar de forma individual o col·lectiva qüestions específiques de major complexitat a les resoltes en els seminaris ordinaris segons les necessitats dels estudiants. Així mateix les tutories serviran per resoldre els dubtes que hagen pogut sorgir al llarg de les classes teòriques i per assessorar els estudiants sobre les estratègies a seguir per evitar les dificultats que se'ls puguem presentar.

**Classes pràctiques (quimioinformàtica):** En aquestes classes els estudiants aprendran a utilitzar programes informàtics relacionats amb els continguts de l'assignatura, així com a accedir a informació rellevant disponible a través d'internet.

**AVALUACIÓ**

En l'avaluació de l'aprenentatge dels estudiants s'haurà de considerar tots els aspectes exposats en l'apartat de metodologia d'aquesta guia i es realitzarà d'una forma contínua per part del professor.



**10% de la qualificació (1 punt):** procedent de l'avaluació directa del professor, resultat del contacte amb l'estudiant en les diferents modalitats d'aprenentatge programades. Es tindran en compte diferents aspectes, com ara l'assistència participativa, el progrés en la utilització del llenguatge característic de la matèria, l'esperit crític, capacitat de col·laborar amb la resta del grup, participació en seminaris, etc. També es podrà realitzar alguna activitat voluntària de tutorització d'estudiantat de cursos anteriors, en temes de química orgànica i la seua relació amb els Objectius de Desenvolupament Sostenible (ODS), que es valorarà positivament en la qualificació.

**10% de la qualificació (1 punt):** Corresponent al seminari-exposició. Aquesta nota només es tindrà en compte si l'alumne té aprovat l'examen teòric.

**80% de la qualificació (8 punts):** S'obindrà a partir dels resultats obtinguts en les proves escrites i en els exàmens. Es podrà realitzar alguna prova escrita sobre les pràctiques d'informàtica, aproximadament cap a final del mes de novembre. Hi haurà un sol examen escrit que es realitzarà en les dates establertes pel Centre. L'examen constarà de qüestions relacionades amb la matèria i preguntes que obliguen l'estudiant a relacionar aspectes de l'assignatura que apareguen en diferents temes o que es complementen amb els vistos a altres assignatures. Els alumnes que no aproven en la primera convocatòria comptaran amb una segona en el mateix curs.

Per superar l'assignatura cal obtenir una qualificació de 5 punts sobre 10.

## REFERÈNCIES

### Bàsiques

- Practical Process Research & Development. A Guide for organic chemists. 2nd Edition. Neal G. Anderson, Academic Press, 2012
- Introducción a la síntesis de fármacos. A. Delgado, C. Minguillón, J. Joglar Editorial Síntesis
- Introducción a la Química Farmacéutica. C. Avendaño. 2ª Edición Mc Graw Hill
- Transition metals in the synthesis of complex organic molecules, 2nd Ed., L. S. Hegedus, University Science Books, 1999
- Green Chemistry in the Pharmaceutical Industry. Edited by P.J. Dunn, A.S. Wells and M.T. Williams. WILEY-VCH, Weinheim, 2010

### Complementàries

- Process Development, Fine Chemicals from Grams to Kilograms, S. Lee y G. Robinson, Oxford Science Publications, OUP 1995
- From Bench to Market, W. Cabri, R. Di Fabio, OUP 2000
- Chirality in Industry I and II, A.N. Collins, G.N. Sheldrake y J. Crosby, John Wiley & Sons Ltd. 1994, 1997



- Organic Synthesis, C. Willis y M. Willis, Oxford Science Publications, OUP 1997
- The Art of Drug Synthesis. Edited by D.S. Johnson and J.J. Li. John Wiley & Sons, Inc., 2007

ESBORRANY