

**FICHA IDENTIFICATIVA****Datos de la Asignatura**

<b>Código</b>	34100
<b>Nombre</b>	Nuevas Perspectivas en Diseño y Síntesis de Fármacos
<b>Ciclo</b>	Grado
<b>Créditos ECTS</b>	4.5
<b>Curso académico</b>	2023 - 2024

**Titulación(es)**

Titulación	Centro	Curso	Periodo
1201 - Grado de Farmacia	Facultad de Farmacia y Ciencias de la Alimentación	5	Primer cuatrimestre

**Materias**

Titulación	Materia	Caracter
1201 - Grado de Farmacia	33 - Nuevas Perspectivas en Diseño y Síntesis de Fármacos	Optativa

**Coordinación**

Nombre	Departamento
DIAZ OLTRA, SANTIAGO	325 - Química Orgánica

**RESUMEN**

La asignatura *Nuevas Perspectivas en Diseño y Síntesis de Fármacos* es una asignatura optativa de carácter semestral y consta de 4.5 créditos en el nuevo Plan de Estudios para Grado en Farmacia.

Su objetivo primario es el conocimiento de los métodos usuales en el diseño y la síntesis de fármacos enantioméricamente puros. Para ello se requiere un conocimiento profundo de las distintas metodologías que conducen a fármacos quirales. Estas ideas básicas se aplicarán a la síntesis industrial de fármacos en la que se comentarán las metodologías más frecuentes, los problemas que se presentan y las soluciones a tomar. Un segundo aspecto a considerar es la química de péptidos, moléculas esenciales tanto desde el punto de vista biológico como químico. La problemática en la síntesis de péptidos, así como el empleo de grupos protectores son otros aspectos a considerar. Importante en el contexto actual es la síntesis de péptidos en fase sólida, así como el diseño por métodos biológicos de los mismos. Las características más significativas de estas estrategias se comentarán con cierto detalle. Dentro de este apartado se estudiarán mediante ejemplos significativos las distintas estrategias en el diseño de una síntesis de péptidos y peptidomiméticos.



Una aproximación alternativa para la síntesis de fármacos quirales es la que se basa en el empleo de metales de transición como catalizadores. Aunque en la asignatura no se pretende realizar un estudio detallado de los principios de catálisis mediada por metales de transición, se considera imprescindible la exposición de unos conceptos básicos y el estudio de los procesos más significativos y actuales en el contexto de la catálisis tanto homogénea como heterogénea. De este modo, se comentarán tanto el ciclo catalítico como los distintos tipos de reacciones de acoplamiento cruzado. Otro aspecto importante en la producción industrial de fármacos es su impacto medioambiental, por lo que se verán los principios básicos de la denominada 'química verde' y se analizarán ejemplos prácticos de su implementación, así como su relación con algunos de los Objetivos de Desarrollo Sostenible (ODS) de las Naciones Unidas. El programa concluye con algunos ejemplos prácticos de síntesis industrial de fármacos, los principios básicos de modelización molecular y los métodos espectroscópicos más actuales en el análisis y diseño de fármacos.

## CONOCIMIENTOS PREVIOS

### Relación con otras asignaturas de la misma titulación

No se han especificado restricciones de matrícula con otras asignaturas del plan de estudios.

### Otros tipos de requisitos

Conocimientos básicos de Química Orgánica y de Química Farmacéutica, tanto a nivel teórico (estructura química, reactividad de grupos funcionales y metodología sintética) como práctico (conocimiento de las técnicas de laboratorio de química orgánica). Conocimientos básicos de Bioquímica estructural.

## COMPETENCIAS

### 1201 - Grado de Farmacia

- Capacidad para transmitir ideas, analizar problemas y resolverlos con espíritu crítico, adquiriendo habilidades de trabajo en equipo y asumiendo el liderazgo cuando sea apropiado.
- Capacidad para obtener y analizar información para afrontar problemas científicos.
- Capacidad para la formación continuada en el desarrollo profesional.
- Conocer técnicas espectroscópicas avanzadas y su aplicación en la investigación de fármacos y principios activos.
- Conocer las características de la industria farmacéutica y los aspectos más relevantes de la síntesis a gran escala.
- Saber plantear secuencias sintéticas para la obtención de determinados principios activos haciendo uso de la metodología aprendida.



- Poder llevar a cabo trabajos de modelización molecular de estructuras orgánicas sencillas haciendo uso del software apropiado.

## RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Después de cursar la asignatura en su doble vertiente teórico-práctica el estudiante ha de ser capaz de:

- \*Utilizar adecuadamente la terminología científica básica relacionada con la materia.
- \*Manifiestar comprensión y conocimiento de los hechos, conceptos, principios y teorías esenciales relacionados con el contenido de la asignatura.
- \*Saber aplicar dichos conocimientos a la comprensión y solución de problemas del entorno cotidiano.
- \*Exponer con propiedad trabajos científicos.
- \*Integrar los conocimientos de síntesis de fármacos con los adquiridos en otras materias.
- \*Evaluar, interpretar las distintas estrategias para sintetizar fármacos.
- \*Reconocer y aplicar el método científico.
- \*Comprender e interpretar trabajos científicos relacionados con la materia.

## DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

### 1. Investigación y Desarrollo de Procesos en la Industria Farmacéutica

1. Introducción: Características de la industria farmacéutica actual. Métodos de estudio de las interacciones de los fármacos con biomoléculas (RMN, rayos X, métodos computacionales,). 2. Síntesis asimétrica: Síntesis de fármacos enantioméricamente puros. Estrategias y ejemplos. 3. Reacciones de acoplamiento cruzado catalizadas por metales. 4. Síntesis de péptidos y grupos protectores: Diseño de una síntesis. Análisis retrosintético. Síntesis en fase homogénea y en fase heterogénea. 5. Química verde: Aspectos a considerar en la selección de una ruta sintética. Equipamiento y seguridad en los procesos. Reactivos de elección y disolventes. La presencia de agua en los procesos. Detección en línea. 6. Desarrollo de procesos: De la obtención en pequeña escala a la síntesis industrial. Ejemplos.

### 2. Práctica en Aula de Informática

Herramientas informáticas en el diseño de fármacos: Modelización molecular. Introducción y ejemplos. Empleo de software adecuado.

**VOLUMEN DE TRABAJO**

ACTIVIDAD	Horas	% Presencial
Clases de teoría	28,00	100
Seminarios	7,00	100
Prácticas en aula informática	6,00	100
Tutorías regladas	2,00	100
<b>TOTAL</b>	<b>43,00</b>	

**METODOLOGÍA DOCENTE**

**Clases teóricas:** Los estudiantes deben adquirir los conocimientos básicos incluidos en el temario mediante su estudio individual y la asistencia a las clases teóricas. En dichas clases el profesor dará una visión global del tema objeto de estudio haciendo especial hincapié en los aspectos más relevantes y en los de especial complejidad. A fin de fomentar la participación activa del estudiante el profesor alternará el método expositivo (lección magistral), el estudio de casos y el planteamiento de problemas. Para el estudio individual y la preparación de los temas con profundidad, se les indicará a los estudiantes la bibliografía adecuada y se proporcionará el necesario material de apoyo.

**Clases prácticas: Seminarios y Problemas:** En ellas se llevará a cabo fundamentalmente la resolución de los problemas planteados previamente, que serán preparados y expuestos por los propios estudiantes. El número reducido de alumnos en cada subgrupo facilitará que su participación sea más activa.

*También podrán llevarse a cabo actividades complementarias de tipo variado (debates, análisis de lecturas, notas de prensa,...) sobre temas de actualidad relacionados con la materia, o se profundizará en algún aspecto concreto del temario cuya comprensión resulte más ardua, si así es requerido por los estudiantes.*

**Tutorías:** Las tutorías se organizan en grupos reducidos de estudiantes, según el calendario establecido (2 en total a lo largo del curso). En ellas, el profesor evaluará el proceso de aprendizaje de los estudiantes de un modo globalizado. Para ello podrá plantear de forma individual o colectiva cuestiones específicas de mayor complejidad a las resueltas en los seminarios ordinarios según las necesidades de los estudiantes. Asimismo las tutorías servirán para resolver las dudas que hayan podido surgir a lo largo de las clases teóricas y para asesorar a los estudiantes sobre las estrategias a seguir para soslayar las dificultades que se les puedan presentar.

**Clases prácticas (quimioinformática):** En estas clases los estudiantes aprenderán a utilizar programas informáticos relacionados con los contenidos de la asignatura, así como a acceder a información relevante disponible a través de internet.



## EVALUACIÓN

En la evaluación del aprendizaje de los estudiantes se considerarán todos los aspectos expuestos en el apartado de metodología de esta guía y se realizará de una forma continua por parte del profesor.

**10% de la calificación (1 punto):** Procederá de la evaluación directa del profesor, resultado del contacto con el estudiante en las distintas modalidades de aprendizaje programadas. Se tendrán en cuenta distintos aspectos, tales como la asistencia participativa, el progreso en la utilización del lenguaje característico de la materia, el espíritu crítico, capacidad de colaborar con el resto del grupo, participación en seminarios, etc. También se podrá realizar alguna actividad voluntaria de tutorización de estudiantado de cursos anteriores, en temas de química orgánica y su relación con los Objetivos de Desarrollo Sostenible (ODS), que se valorará positivamente en la calificación.

**10% de la calificación (1 punto):** Correspondiente al seminario-exposición. Esta nota sólo se tendrá en cuenta si el alumno tiene aprobado el examen teórico.

**80% de la calificación (8 puntos):** Se obtendrá a partir de los resultados obtenidos en las pruebas escritas y en los exámenes. Se podrá realizar alguna prueba escrita sobre las prácticas de informática, aproximadamente hacia final del mes de noviembre. Habrá un solo examen escrito que se realizará en las fechas establecidas por el Centro. El examen constará de cuestiones relacionadas con la materia y preguntas que obliguen al estudiante a relacionar aspectos de la asignatura que aparezcan en distintos temas o que se complementen con los vistos en otras asignaturas. Los alumnos que no aprueben en la primera convocatoria contarán con una segunda en el mismo curso.

Para superar la asignatura es necesario obtener una calificación de 5 puntos sobre 10.

## REFERENCIAS

### Básicas

- 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

### Complementarias



- 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