



FITXA IDENTIFICATIVA

Dades de l'Assignatura

Codi	43027
Nom	Aïllament guiat i identificació de productes naturals bioactius
Cicle	Màster
Crèdits ECTS	5.0
Curs acadèmic	2023 - 2024

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
2138 - M.U. en Investigació i Ús Racional del Medicament 12-V.2	Facultat de Farmàcia i Ciències de l'Alimentació	1	Primer quadrimestre
3103 - Biomedicina i Farmàcia	Escola de Doctorat	0	Primer quadrimestre
3170 - Programa de Doctorat en Biomedicina i Farmàcia	Escola de Doctorat	0	Primer quadrimestre

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
2138 - M.U. en Investigació i Ús Racional del Medicament 12-V.2	5 - Aïllament guiat i identificació de productes naturals bioactius	Optativa
3103 - Biomedicina i Farmàcia	1 - Complementos Formació	Optativa
3170 - Programa de Doctorat en Biomedicina i Farmàcia	1 - Complementos de Formació	Optativa

Coordinació

Nom	Departament
CABEDO ESCRIG, NURIA	135 - Farmacologia
CORTES MARTINEZ, DIEGO MIGUEL	135 - Farmacologia

RESUM

Assignatura optativa que pertany a l'itinerari investigador del "Màster en Investigació i Ús Racional del Medicament" que pretén abordar els aspectes més importants de la metodologia de treball en el laboratori en el camp de la investigació de noves molècules naturals d'interès farmacològic. Està dedicada al procés de síntesi, purificació i elucidació estructural de productes naturals bioactius.



Objectius:

Conéixer les bases teòriques-pràctiques inicials dels processos de síntesi química d'anàlegs de molècules naturals amb interès terapèutic, la metodologia d'extracció i purificació mitjançant cromatografia en columna, així com l'elucidació estructural mitjançant ressonància magnètica nuclear, HPLC i espectrometria de masses.

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

Per a poder seguir be el desenvolupament dels temes, el student ha de tindre coneixements previs de Farmacognòsia, Química Orgànica, Química Analítica i Farmacologia, principalment.

COMPETÈNCIES

2138 - M.U. en Investigació i Ús Racional del Medicament 12-V.2

- Que els estudiants sàpiguem comunicar les conclusions (i els coneixements i les raons últimes que les sustentem) a públics especialitzats i no especialitzats d'una manera clara i sense ambigüitats.
- Que els estudiants posseïsquem les habilitats d'aprenentatge que els permeten continuar estudiant d'una forma que haurà de ser en gran manera autodirigida o autònoma.
- Ser capaços d'accedir a la informació necessària (bases de dades, articles científics, etc.) i tenir prou criteri per a la seua interpretació i utilització.
- Ser capaços d'accedir a ferramentes d'informació en altres àrees del coneixement i utilitzar-les apropiadament.
- Ser capaços d'aplicar l'experiència investigadora adquirida en tasques pròpies de la seva professió, tant en l'empresa privada com en organismes públics.
- Capacitat de seleccionar i gestionar els recursos disponibles (instrumentals i humans) per a optimitzar resultats en investigació.
- Dominar el mètode científic, el plantejament de protocols experimentals i la interpretació de resultats en la busca, desenrotllament i avaluació de nous fàrmacs.

RESULTATS DE L'APRENENTATGE

**DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS****1. Síntesi, aïllament i elucidació de molècules naturals bioactives**

Reaccions químiques utilitzades en la preparació d'estructures de productes naturals. Seguiment de les reaccions mitjançant cromatografia en capa fina. Aplicació dels mètodes convencionals de purificació de molècules orgàniques: extracció líquid / líquid i cromatografia en columna. Fonaments i aplicacions de la cromatografia líquida d'alta pressió (*HPLC) Elucidació estructural de molècules naturals o sintètiques mitjançant ressonància magnètica nuclear (RMN).

VOLUM DE TREBALL

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Classes de teoria	30,00	100
Pràctiques en laboratori	15,00	100
Tutories reglades	5,00	100
Estudi i treball autònom	15,00	0
Lectures de material complementari	15,00	0
Preparació d'activitats d'avaluació	15,00	0
Preparació de classes de teoria	15,00	0
Preparació de classes pràctiques i de problemes	15,00	0
TOTAL	125,00	

METODOLOGIA DOCENT

Durant les activitats, tant teòriques com pràctiques, s'indicaran les aplicacions dels continguts de l'assignatura en relació amb els Objectius de Desenvolupament Sostenible (ODS). Amb això es pretén proporcionar coneixements, habilitats i motivació per comprendre i abordar aquests ODS, alhora que es promou la reflexió i la crítica.

En aquesta assignatura s'utilitzaran com metodologies docents la lliçó magistral, seminaris sobre elucidació estructural i pràctiques de laboratori sobre síntesi, extracció, aïllament i identificació de productes naturals per a poder entendre els protocols que s'utilitzen.

A més, també s'utilitzarà l'Aula Virtual per a debatre i aclarir dubtes amb els estudiants sobre els diferents temes estudiats al llarg del programa, així com per a facilitar-los material complementari.



AVALUACIÓ

REFERÈNCIES

Bàsiques

- Tietze, L. F., Eicher, T., Diederichsen, U., Speicher, A. Reactions and Synthesis: in the organic chemistry laboratory, Weinheim, Alemanian, 2007, Wiley-VCH.
- Nicolaou, K. C., Sorensen, E. J. Classics in total synthesis: targets, strategies, methods, Weinheim, Alemanian, 1996, VCH.
- Dewick, P.M. Medicinal Natural Products. A Biosynthetic Approach, 3^a ed. 2009, J. Wiley & Sons.
- Wagner, H. and Bladt S. Plant drug analysis, 2009, Springer.
- Cannell, R.J.P. (ed.) (1998): Natural Products Isolation, Totowa, Humana Press.
- Colegate, S.M.; Molyneux, R.J. (eds.) (1993): Bioactive Natural Products. Detection, isolation and structural determination, CRC Press, Boca Raton.
- Vogel, H.G.; Vogel, W.H. (eds.) (1997): Drug Discovery and Evaluation. Pharmacological Assays, Berlin, Springer Verlag.
- Wagner, H., Bladt, S. (1996): Plant Drug Analysis. A Thin layer Chromatography Atlas, 2^a Edició, Berlin, Springer.

Complementàries

- Andlauer, W. et al (1999): Determination of selected phytochemicals by reversed-phase high-performance liquid chromatography combined with ultraviolet and mass spectrometric detection. J. Chromatogr. A 849, 341-348.
- Bradshaw, J. et al. (2001): A rapid and facile method for the dereplication of purified natural products, J. Nat. Prod. 64, 1541-1544.
- Azmir, J., Zaidul, I.S.M. et al. (2013): Techniques for extraction of bioactive compounds from plant materials: A review. J Food Engineer. 117, 426-436.
- Broach, J.R.; Thorner, J. (1996): High-throughput screening for drug discovery, Nature 384, 14-16
- Bross-Walch, N., Kühn, T., Moskau, D., Zerbe, O. (2005): Strategies and tools for structure determination of natural products using modern methods of NMR spectroscopy (review). Chemistry and Biodiversity 2, 147-77.
- Claridge, T.D.W. (2009): High Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry, Tetrahedron Organic Chemistry, Vol 27, pp 1-383, Elsevier. ISBN-978-0-08-054628-5
- Foucault, A.P., Chevreton, L. (1998): Counter-current chromatography: instrumentation, solvent selection and some recent applications to natural product purification, J. Chromatogr. A 808, 3-22.



- Jarvis, A.P., Morgan E.D. (1997): Isolation of plant products by supercritical-fluid extraction, *Phytochem. Anal.* 8, 217-222.
- Keeler, J. (2010): *Understanding NMR Spectroscopy*, Wiley. ISBN: 978-0-470-74609-7. <http://www-keeler.ch.cam.ac.uk/lectures/Irvine/>
- LaCourse, W.R., Dasenbrock, C.O. (1998): Column liquid chromatography: equipment and instrumentation, *Anal. Chem.* 70, 37R-52R.
- Wickberg, B. (1993): Chemical methods in ethnopharmacology, *J. Ethnopharmacol.* 38, 159-165.
- Wolfender, J.L., Rodríguez, S., Hostettmann, K. (1998): Liquid chromatography coupled to mass spectrometry and nuclear magnetic resonance spectroscopy for the screening of plant constituents, *J. Chromatogr. A* 794, 299-316.
- Schwikkard, S.L., Mulholland, D.A. (2014): Useful methods for targeted plant selection in the discovery of potential new drug candidates. *Planta Med* 80:1154-1160.
- Romanik, G., Gilgenast, E., Przyjazny, A., Kaminski, M. (2007): Techniques of preparing plant material for chromatographic separation and analysis. *J Biochem Biophys Methods* 70: 253-261.
- Renault, JH. (2015): Modern Separation Techniques for the Isolation of Natural Products. *Planta Med.* 81(17):1569.
- Teo CC, Tan SN, Yong JW, Hew CS, Ong ES. (2010): Pressurized hot water extraction (PHWE). *J Chromatogr A.* 1217(16):2484-94.
- Wohlgemuth. R. (2014). Chiral LC-MS/MS of D-and L-2-Hydroxyglutaric Acid Biomarkers. *Reporter Appl Newsletter* 56:11.