



UNIVERSIDAD  
DE SEVILLA

## PROYECTO DOCENTE

### Química de Compuestos Bioactivos

Grp de Clases Teóricas de Química de Compuestos Bioactivos (1)

CURSO 2024-25

## Datos básicos de la asignatura

---

<b>Titulación:</b>	Máster Universitario en Química Sanitaria (US, UCO, UHU y UNEX)
<b>Año plan de estudio:</b>	2024
<b>Curso implantación:</b>	2024-25
<b>Centro responsable:</b>	Facultad de Química
<b>Nombre asignatura:</b>	Química de Compuestos Bioactivos
<b>Código asignatura:</b>	52220012
<b>Tipología:</b>	OBLIGATORIA
<b>Curso:</b>	1
<b>Periodo impartición:</b>	Segundo cuatrimestre
<b>Créditos ECTS:</b>	6
<b>Horas totales:</b>	150

## Coordinador de la asignatura

---

LOPEZ LOPEZ, OSCAR

## Profesorado (puede sufrir modificaciones a lo largo del curso por necesidades organizativas del Departamento)

---

### Profesorado de grupo principal

FERNANDEZ-BOLAÑOS GUZMAN, JOSE MARIA

LOPEZ LOPEZ, OSCAR

## Objetivos y resultados del aprendizaje

---

\* Conocimientos o contenidos al terminar la titulación:

- C05: Comprende el modo de acción de un fármaco desde su administración hasta su eliminación del organismo y los fundamentos teóricos de las interacciones que se establecen entre un fármaco y su diana terapéutica.

- C06: Reconoce las innovaciones y las tendencias de futuro de la investigación en diferentes ámbitos de la química sanitaria y su aplicación a la resolución de problemas en el ámbito biosanitario.

\* Habilidades o destrezas al terminar la titulación-Habilidades técnicas y prácticas que involucran destrezas y el uso de métodos, materiales, herramientas e instrumentos:

- HD06: Opera con las herramientas de la química computacional y sintética junto a las biológicas en el estudio del modo de acción de los fármacos y en su diseño.

- HD07: Presenta, tanto en forma escrita como oral, material y argumentación científica a una audiencia especializada.

- HD08: Realiza la búsqueda, revisión crítica e integración de la información científico-técnica en el ámbito de la química sanitaria.

\* Competencias en el entorno del aprendizaje:

- COM02: Presenta compromiso ético. Demuestra ser crítico y autocrítico en el ámbito de la química sanitaria, considerando aspectos tales como la ética profesional, los valores morales y las implicaciones sociales de las diferentes actividades realizadas.

## Contenidos o bloques temáticos

---

Tema 1. Aspectos generales de compuestos bioactivos, fármacos y medicamentos

Conceptos generales. Historia de la farmacopea.

Tema 2. Compuestos bioactivos

Criterios de clasificación de fármacos. Compuestos bioactivos de origen natural. Compuestos inorgánicos bioactivos.

Tema 3. Dianas terapéuticas

Proteínas: enzimas y receptores. Agonistas y antagonistas. Ácidos nucleicos. Lípidos. Carbohidratos.

Tema 4. Aspectos energéticos en la interacción fármaco-diana terapéutica.

Simulación computacional del acoplamiento fármaco-diana (docking molecular). Compuestos bioactivos como moduladores de la interacción entre macromoléculas biológicas. Compuestos bioactivos duales.

Tema 5. Farmacocinética

Absorción. Distribución. Metabolismo. Eliminación.

Tema 6. Principales familias de fármacos

Antibacterianos. Antivirales. Anticáncer. Anti-colinesterasas. Acción sobre SNC. Cardiovasculares. Analgésicos. Anti-úlceras. Otros.

Tema 7. Fármacos y quiralidad

Importancia de la quiralidad en fármacos. Fármacos racémicos vs. fármacos enantioméricamente puros. Métodos analíticos para el control del exceso enantiomérico. Estrategias para la obtención de fármacos enantioméricamente puros: resolución de racémicos, síntesis estereoselectivas, chiral pool, síntesis enzimáticas.

Tema 8. Diseño de fármacos (I)

Modulación de la farmacocinética. Profármacos. Fármacos basados en productos naturales. Metabolitos secundarios. Química combinatoria. Modificación estructural: Series homólogas, principio de vinilología, isosterismo y bioisosterismo.

Tema 9. Diseño de fármacos (II)

Introducción al diseño de fármacos asistido por ordenador (CADD): Técnicas basadas en la estructura de la diana terapéutica (Structure-Based Drug Design, SBDD) y en la estructura del ligando (Ligand-Based Drug Design, LBDD). Viabilidad de un compuesto bioactivo como fármaco: descriptores moleculares y su relación con la Regla del cinco de Lipinski y propiedades ADME.

Tema 10. Bases de datos y aplicaciones bioinformáticas en CADD

Protein Data Bank (PDB), PubChem, DrugBank, diagramas de interacciones, predicción propiedades ADME, predicción de dianas no deseadas (efectos secundarios), predicción del metabolismo, búsqueda de compuestos similares en librerías virtuales.

Tema 11. Relaciones cuantitativas estructura-actividad (QSAR)

Ecuaciones de Hammett. Ecuaciones de Taft. Método de Hansch. Método de Free-Wilson. Diagrama de Craig. Árbol de decisión de Topliss. QSAR 3D: metodología CoMFA.

Tema 12. Química de los compuestos bioactivos y sostenibilidad.

Economía atómica, factor E y cociente medioambiental. Otras métricas de sostenibilidad de procesos. Biocatálisis, quimio-catálisis y síntesis quimioenzimática. Disolventes verdes/sostenibles y medios de reacción no convencionales.

## Relación detallada y ordenación temporal de los contenidos

---

### Actividades formativas y horas lectivas

---

Actividad	Horas
A Clases Teóricas	45

### Idioma de impartición del grupo

---

ESPAÑOL

### Sistemas y criterios de evaluación y calificación

---

Se empleará un sistema de evaluación continua, donde se utilizarán tres criterios de evaluación:

Preguntas de corto desarrollo y/o tipo test realizadas en el transcurso de las clases teóricas



UNIVERSIDAD  
DE SEVILLA

## PROYECTO DOCENTE

### Química de Compuestos Bioactivos

#### Grp de Clases Teóricas de Química de Compuestos Bioactivos (1)

CURSO 2024-25

Exposición y debate acerca de un artículo relacionado con el contenido teórico de la asignatura

Examen, con preguntas de desarrollo y cuestiones relacionadas con las exposiciones

## Metodología de enseñanza-aprendizaje

---

Las clases teóricas, única actividad formativa contemplada en la asignatura, se basarán en clases magistrales donde se fomentará la participación activa del alumno, promoviendo el debate sobre los temas que se desarrollen.

Adicionalmente se utilizará la plataforma virtual de aprendizaje disponible en cada universidad, que permitirá, no sólo alojar el contenido de las clases teóricas, sino también publicar diverso contenido (ej. vídeos, páginas webs) para fomentar el autoaprendizaje del alumno. Esto se favorecerá también mediante el uso de exposiciones cortas basadas en el manejo de artículos de revisión relacionados con la temática de la asignatura.

## Horarios del grupo del proyecto docente

---

<https://quimica.us.es/docencia/horarios-y-examenes>

## Calendario de exámenes

---

<https://quimica.us.es/docencia/horarios-y-examenes>

## Tribunales específicos de evaluación y apelación

---

Presidente: ROSARIO FATIMA FERNANDEZ FERNANDEZ

Vocal: MARIA DEL CARMEN ORTIZ MELLET

Secretario: JOSE MARIA FERNANDEZ-BOLAÑOS GUZMAN

Suplente 1: MIGUEL ANGEL RODRIGUEZ CARVAJAL

Suplente 2: MARIA ISABEL GARCIA MORENO

Suplente 3: ANA TERESA CARMONA ASENJO

## Sistemas y criterios de evaluación y calificación del grupo

---

### Criterio de calificación

-Preguntas de corto desarrollo y/o tipo test realizadas en el transcurso de las clases teóricas  
20%



UNIVERSIDAD  
D SEVILLA

## PROYECTO DOCENTE

### Química de Compuestos Bioactivos

#### Grp de Clases Teóricas de Química de Compuestos Bioactivos (1)

CURSO 2024-25

-Exposición y debate acerca de un artículo relacionado con el contenido teórico de la Asignatura  
20%

-Examen, con preguntas de desarrollo y cuestiones relacionadas con las exposiciones 60%

## Bibliografía recomendada

---

### Bibliografía General

An introduction to Medicinal Chemistry

Autores: Graham L. Patrick

Edición: Ed. Oxford

Publicación: 2023 (7ª Ed.)

ISBN: 978-0198866664

Introducción a la Síntesis de Fármacos

Autores: Antonio Delgado, Cristina Minguillón, Jesús Joglar

Edición: Editorial Síntesis

Publicación: 2003

ISBN: 9788497560290

Burger's Medicinal Chemistry & Drug discovery

Autores: D.J. Abraham (editor)

Edición: Wiley Interscience

Publicación: 2003 (6ª Ed.), Vol. I

ISBN: 0-471-27090-3

Green chemistry in the Pharmaceutical Industry

Autores: P. J. Dunn, A.S. Wells, M.T. Williams (Editores),

Edición: Wiley-VCH, Weinheim

Publicación: 2010

ISBN: 978-3-527-32418-7

Green Chemistry in Drug Discovery. From Academia to Industry

Autores: P.F. Richardson

Edición: Humana Press

Publicación: 2022

ISBN: 1557-2153

Applications of transition metal catalysis in drug discovery and development. An industrial perspective

Autores: M.L. Crawley, B.M. Trost (Editores)

Edición: Wiley, New Jersey

Publicación: 2012

ISBN: 9780470631324



UNIVERSIDAD  
DE SEVILLA

## PROYECTO DOCENTE

### Química de Compuestos Bioactivos

Grp de Clases Teóricas de Química de Compuestos Bioactivos (1)

CURSO 2024-25

Green and Sustainable Solvents in Chemical Processes

Autores: C. J. Clarke, W.-C. Tu, O. Levers, A. Bröhl, J.P. Hallett

Edición: 2018 (Artículo en revista)

Publicación: Chem. Rev., 2018, 118, 747-800

ISBN:

Computational Drug Design. A Guide for Computational and Medicinal Chemists

Autores: D. C. Young

Edición: John Wiley & Sons

Publicación: 2009 (1ª Ed.)

ISBN: 978-0470126851

The Organic Chemistry of Drug Design and Drug Action

Autores: R. Silverman, M.W. Holladay,

Edición: Academic Press

Publicación: 2014 (3ª Ed.)

ISBN: ISBN-13 978-0126437324 Edición

#### Información Adicional