

Datos básicos de la asignatura

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

Objetivos y resultados del aprendizaje

- 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.
- 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.
- COM05: Tiene capacidad creativa y emprendedora. Desarrolla las capacidades y la actitud emprendedora para aplicarlas al análisis y diseño de proyectos de innovación en el campo sanitario. Busca e integra nuevos conocimientos y actitudes.

- HD04: Propone nuevas iniciativas empresariales basadas en el conocimiento para identificar necesidades no cubiertas (#unmet needs#) o retos a resolver en el campo sanitario utilizando herramientas de generación de nuevas ideas y creatividad.
- HD05: Aplica las técnicas analíticas más adecuadas para la separación, identificación y cuantificación de analitos en diferentes matrices y muestras clínicas complejas.
- 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.

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. Farmacocinética

Absorción. Distribución. Metabolismo. Eliminación.

Tema 5. Principales familias de fármacos

Antibacterianos. Antivirales. Anticáncer. Anti-colinesterasas. Acción sobre el sistema nervioso. Cardiovasculares. Analgésicos. Anti-úlceras. Otros.

Tema 6. 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 7. 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 8. 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 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.

Actividades formativas y horas lectivas

Actividad	Horas
A Clases Teóricas	45

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.

Sistemas y criterios de evaluación y calificación

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



UNIVERSIDAD
DE SEVILLA

PROGRAMA DE LA ASIGNATURA

Química de Compuestos Bioactivos

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

Asistencia

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



UNIVERSIDAD
DE SEVILLA

PROYECTO DOCENTE

Química de Compuestos Bioactivos

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

CURSO 2025-26

Datos básicos de la asignatura

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

Coordinador de la asignatura

LOPEZ LOPEZ, OSCAR

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

Profesorado del grupo de actividad principal

FERNANDEZ-BOLAÑOS GUZMAN, JOSE MARIA

LOPEZ LOPEZ, OSCAR

Objetivos y resultados del aprendizaje

- 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.

- 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.
- COM05: Tiene capacidad creativa y emprendedora. Desarrolla las capacidades y la actitud emprendedora para aplicarlas al análisis y diseño de proyectos de innovación en el campo sanitario. Busca e integra nuevos conocimientos y actitudes.
- HD04: Propone nuevas iniciativas empresariales basadas en el conocimiento para identificar necesidades no cubiertas (#unmet needs#) o retos a resolver en el campo sanitario utilizando herramientas de generación de nuevas ideas y creatividad.
- HD05: Aplica las técnicas analíticas más adecuadas para la separación, identificación y cuantificación de analitos en diferentes matrices y muestras clínicas complejas.
- 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.

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. Farmacocinética

Absorción. Distribución. Metabolismo. Eliminación.

Tema 5. Principales familias de fármacos

Antibacterianos. Antivirales. Anticáncer. Anti-colinesterasas. Acción sobre el sistema nervioso. Cardiovasculares. Analgésicos. Anti-úlceras. Otros.

Tema 6. 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 7. 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 8. 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 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

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

Asistencia

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

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: ELENA MATILDE SANCHEZ FERNANDEZ

Vocal: FRANCISCO JAVIER IGLESIAS SIGUENZA

Secretario: VALENTIN HORNILLOS GOMEZ-RECUERO

Suplente 1: JOSE LUIS JIMENEZ BLANCO

Suplente 2: JUAN VAZQUEZ CABELLO

Suplente 3: ELENA DIEZ MARTIN

Sistemas y criterios de evaluación y calificación del grupo

Sistemas de evaluación

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

Asistencia

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

Criterio de calificación

Se empleará un sistema de evaluación continua, con los siguientes criterios:

- Examen presencial, con preguntas de corto desarrollo o de tipo test sobre todo el contenido de la asignatura, una vez se ha finalizado el temario: 40%.
- Cuestionarios realizados en las clases magistrales: 20%.
- Elaboración de un vídeo breve, sobre un tema relacionado con el contenido de la asignatura y asignado por el profesorado: 20%.
- Asistencia (física o virtual) a las sesiones magistrales: 20%.

Las calificaciones parciales se conservarán durante un curso académico.

En el caso de estudiantes a tiempo parcial, en la medida de lo posible, se facilitará la asistencia en función de sus necesidades. En el caso de estudiantes con necesidades educativas especiales, el profesorado se reunirá con los alumnos afectados para establecer las adaptaciones más adecuadas a cada caso particular, siguiendo las indicaciones del informe emitido por la Universidad que corresponda.

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

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



UNIVERSIDAD
DE SEVILLA

PROYECTO DOCENTE

Química de Compuestos Bioactivos

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

CURSO 2025-26

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