

41  
1999

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES  
U.B.A.

1.- DEPARTAMENTO de QUIMICA ORGANICA

2.- CARRERA DE: POSTGRADO/DOCTORADO

3.- 1er. CUATRIMESTRE Año : 1999

4.- N° DE CODIGO DE CARRERA : 51

5.- MATERIA: QUIMICA MEDICINAL

N° DE CODIGO:-----

6.- PUNTAJE PROPUESTO : 3 puntos

7.- PLAN DE ESTUDIO Año : 1987

8.- CARACTER DE LA MATERIA : optativa

9.- DURACION : Dos meses

10.-HORAS DE CLASE SEMANAL: --

- |                |          |                        |          |
|----------------|----------|------------------------|----------|
| a) Teóricas    | : 42 Hs. | d) Seminarios          | : 18 Hs. |
| b) Problemas   | : - Hs.  | e) Problemas-seminario | : -- Hs. |
| c) Laboratorio | : - Hs.  | d) Teórico-Practico    | : -- Hs. |

g) Totales : 60 Hs.

11.-CARGA HORARIA TOTAL : 60 hs.

12.-ASIGNATURAS CORRELATIVAS :---

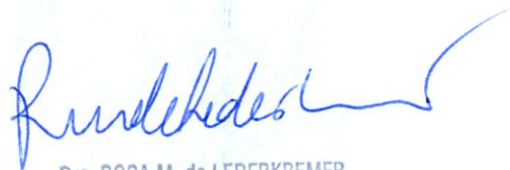
13.-FORMA DE EVALUACION : Seminario y Examen final.

14.-PROGRAMA ANALITICO : Se adjunta

15.-BIBLIOGRAFIA : Se adjunta



Dr. GERARDO BURTON



Dra. ROSA M. de LEDERKREMER  
Directora Depto. Química Orgánica

# Química Medicinal

## Programa Analítico

### Actividad de drogas y mecanismos de acción.

Consideraciones generales. Factores que afectan la actividad biológica. Teorías de la actividad de drogas. Aspectos cuantitativos de la acción de drogas. Concepto del receptor en el mecanismo de acción de drogas. Caracterización del receptor. Nuevas drogas. Estimulación de enzimas. Inhibición de enzimas. Sulfonamidas. Drogas activas en membranas.

### Descubrimiento, diseño y desarrollo de drogas

Búsqueda de una droga nueva. Búsqueda sin una droga líder. Diseño sobre la base de una droga líder. Estudio racional para la búsqueda de una droga líder. Modificación de una estructura líder. Identificación de la parte activa: Farmacóforo. Modificaciones de grupos funcionales. Relación entre la estructura química y la actividad biológica (SAR). Modificaciones estructurales para incrementar la acción biológica y el índice terapéutico. Relación estructura química-actividad biológica cuantitativa (QSAR). Correlación de parámetros fisicoquímicos con actividad biológica. Diseño asistido por computadora (CAMD). Ejemplos.

### Química combinatoria.

Fundamentos. Bibliotecas combinatoriales. Síntesis orgánica combinatoria. Ejemplos

### Receptores y enzimas

Estructura del receptor. Consideraciones generales. Fuerzas involucradas en el complejo droga-receptor. Ionización. Determinación de las interacciones droga-receptor. Teoría droga-receptor. Consideraciones topográficas y estereoquímicas. Bloqueantes de canales iónicos. Ejemplos de diseño racional de antagonistas de un receptor. Mecanismo de catalisis enzimática. Catálisis de coenzimas. Terapia enzimática.

### Inhibición enzimática

Fundamentos. Resistencia a las drogas. Mecanismo. Sinergismo de drogas. Bloqueo secuencial. Inhibición de enzimas en distintos caminos metabólicos. Uso múltiple de drogas para la misma enzima blanco. Inhibidores enzimáticos reversibles. Inhibidores competitivos reversibles. Análogos de estados de transición. Análogos multisustrato. Inhibidores irreversibles. Agentes de unión por afinidad. Mecanismo de acción de desactivantes enzimáticos.

### Agentes que interaccionan con el ADN

Fundamentos para la interacción de drogas con el ADN. Toxicidad. Propiedades y Estructura del ADN. Tipos de drogas que interaccionan con el ADN. Agentes alquilantes de ADN. Agentes que escinden cadenas de ADN.

GB

### **Metabolismo e inactivación de drogas.**

Métodos de estudio del metabolismo de drogas. Caminos de desactivación y eliminación de drogas: biotransformaciones oxidativas, reductivas e hidrolíticas; reacciones de conjugación. Drogas "blandas" y "duras".

### **Prodrogas: diseño y aplicaciones**

Concepto de prodroga. Tipos de prodrogas. Mecanismos de activación de prodrogas. Prodrogas unidas a un transportador. Prodrogas bioprecursoras. Ejemplos.

### **Ejemplos y aplicaciones**

Péptidos y peptidomiméticos; Interacciones péptido-receptor; estrategias para el desarrollo de peptidomiméticos. Agentes antimicrobianos: antibióticos, antiparasíticos, antivirales. Agentes anticáncer: ADN como blanco de drogas anticáncer; drogas que actúan sobre el aparato mitótico. Analgésicos y antiinflamatorios: distintos tipos; mecanismos de acción.

Antagonistas de histamina y anestésicos locales. Derivados esteroidales: corticoides, hormonas sexuales, esteroides neuroactivos.

### **Bibliografía.**

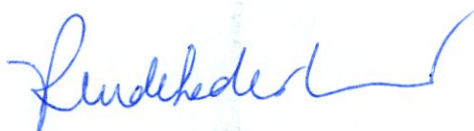
"The Organic Chemistry of Drug Design and Drug Action", R. B. Silverman. Academic Press. 1992.

"A Textbook of Drug Design and Development", P. Krogsgaard-Larsen, T. Liljefors y U. Madsen. 2da edición. Harwood Academic Publishers. 1996.

"Introduction to Medicinal Chemistry. How Drugs Act and Why", A. Gringauz. Wiley-VCH. 1997.



Dr. GERARDO BURTON



Dra. ROSA M. de LEDERKREMER  
Directora Depto. Química Orgánica