

QUIMICA MEDICINAL

CARRERA: Licenciatura en Ciencias Químicas

CÓDIGO : 4116

PUNTAJE: 3 puntos (Doctorado)

PLAN DE ESTUDIO: 1987

CARÁCTER DE LA MATERIA: Optativa

DURACIÓN: 2 meses

CARGA HORARIA: Teóricas (42 horas), Seminarios (18 horas). Total: 60 horas.

FORMA DE EVALUACIÓN: Seminario y Examen Final

PROGRAMA

Actividad de drogas y mecanismos de acción.

Consideraciones generales. Clasificación de drogas. Fases que gobiernan la actividad de una droga en el organismo. Factores que afectan la bioactividad. Mecanismos de acción de las drogas.

Descubrimiento de nuevas drogas

Descubrimientos sin una droga líder: Penicilina y Librium. Estrategias para la búsqueda de nuevos compuestos líder. Ejemplos. Bibliotecas combinatoriales. Síntesis orgánica combinatoria. Ejemplos. Productos naturales como fuentes de drogas líder.

Desarrollo de nuevas drogas

Modificación de una estructura líder. Concepto de farmacóforo. Relación entre la estructura química y la actividad biológica (SAR). Modificaciones estructurales para mejorar potencia e índice terapéutico: series homólogas, reemplazos bioisostéricos, transformaciones de anillos y cadena/anillo. Estrategias generales de diseño de drogas. Efectos específicos de sustituyentes. Aspectos estereoquímicos de la acción de drogas.

Receptores como blancos de las drogas

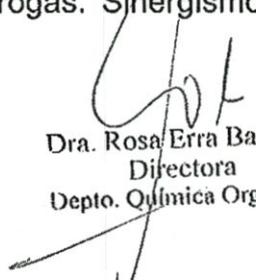
Tipos de receptores. Consideraciones generales. Agonistas y antagonistas. Teorías de la interacción droga-receptor. Fuerzas involucradas en el complejo droga-receptor. Rol de los grupos funcionales. Determinación de la energía libre de unión. Ejemplos.

Relaciones cuantitativas estructura química-actividad biológica (QSAR)

Correlación de parámetros fisicoquímicos con actividad biológica. Análisis de Hansch. Método de Free y Wilson. Arbol de decisión de Topliss y gráficos de Craig. Metodologías QSAR-3D. Mapeo de receptores. Ejemplos.

Mecanismos de acción de drogas

Acción sobre enzimas. Mecanismo de catálisis enzimática. Catálisis por aproximación. Catálisis covalente. Catálisis general ácido base. Catálisis electrostática y por desolvatación. Catálisis por tensión. Catálisis de coenzimas: 5'fosfato de piridoxal, tetrahidrofolato, flavina, hemo, coenzima A, trifosfato de adenosina. Resistencia a las drogas. Sinergismo de drogas. Inhibición de enzimas. Inhibidores


Dra. Rosa Erra Balsells
Directora
Depto. Química Orgánica



reversibles competitivos. Inhibidores reversibles no competitivos. Inhibidores lentos de unión fuerte. Inhibidores irreversibles. Ejemplos.

Acción sobre proteínas. Acción sobre proteínas transportadoras. Resistencia múltiple a las drogas. Acción sobre proteínas estructurales: tubulina. Ejemplos.

Acción sobre membrana celular. Modificaciones de las propiedades de las membranas. Disruptores de membrana. Formadores de poros. Ejemplos.

Acción sobre el ADN. Fundamentos. Estructura del ADN. Agentes intercalantes en el ADN. Agentes alquilantes del ADN. Agentes que escinden cadenas de ADN. Ejemplos.

Metabolismo e inactivación de drogas.

Camino de desactivación y eliminación de drogas: biotransformaciones oxidativas, reductivas e hidrolíticas; reacciones de conjugación. Métodos de estudio del metabolismo de drogas.

Prodrogas: diseño y aplicaciones

Activación de drogas por enzimas. Diseño de prodrogas para mejorar las propiedades farmacodinámicas y farmacocinéticas. 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 esteroideos: corticoides, hormonas sexuales, esteroideos neuroactivos.

Bibliografía.

"The Practice of Medicinal Chemistry", C. G. Wermuth, Academic Press. 1996.

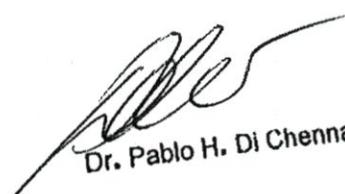
"The Organic Chemistry of Drug Design and Drug Action", R. B. Silverman. Academic Press. 1992.

"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.


Dra. Rosa Erra Balsells
Directora
Centro. Química Orgánica


Dr. Juan Baulista Rodríguez


Dr. Pablo H. Di Chenna



Universidad de Buenos Aires
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Referencia Expte. N° 480.950/16

Buenos Aires, 14 MAR 2016

VISTO:

la nota de la Dra. Rosa Erra Balsells, Directora del Departamento de Química Orgánica, mediante la cual eleva la información del curso de posgrado **Química medicinal**, que será dictado durante el primer cuatrimestre de 2016 por el Dr. Juan baulista Rodríguez y el Dr. Pablo Héctor Di Chenna,

CONSIDERANDO:

- lo actuado por la Comisión de Doctorado,
- lo actuado por la Comisión de Postgrado,
- lo actuado por este Cuerpo en Sesión Ordinaria realizada en el día de la fecha,
- en uso de las atribuciones que le confiere el Artículo N° 113° del Estatuto Universitario,

EL CONSEJO DIRECTIVO DE LA FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES
RESUELVE:

Artículo 1°: Autorizar el dictado del curso de posgrado **Química medicinal**, de 60 horas de duración.

Artículo 2°: Aprobar el programa del curso de posgrado **Química medicinal**, obrante a fs 21 y 22 del expediente de la referencia.

Artículo 3°: Aprobar un puntaje máximo de tres (3) puntos para la Carrera del Doctorado.

Artículo 4: Comuníquese a la Dirección de Alumnos, a la Dirección del Departamento de Química Orgánica, y a la Secretaría de Postgrado.

Artículo 5: Comuníquese a la Biblioteca de la FCEN con fotocopia del programa incluido (fs 21 y 22). Cumplido archívese.

Resolución CD N°
SP.04 19 02/2016

0392

Dr. PABLO J. PAZOS
Secretario Adjunto de Posgrado
FCEyN - UBA

Dr. JUAN CARLOS REBOREDA
DECANO