



Ministerio de Cultura y Educación
Universidad Nacional de San Luis
Facultad de Química Bioquímica y Farmacia
Departamento: Farmacia
Area: Farmacognosia

(Programa del año 2026)
(Programa en trámite de aprobación)
(Presentado el 16/06/2026 12:11:42)

I - Oferta Académica

Materia	Carrera	Plan	Año	Período
QUIMICA MEDICINAL	FARMACIA	19/13	2026	1° cuatrimestre

II - Equipo Docente

Docente	Función	Cargo	Dedicación
ENRIZ, RICARDO DANIEL	Prof. Responsable	P.Tit. Exc	40 Hs
GIANNINI, FERNANDO ANGEL	Prof. Colaborador	P.Tit. Exc	40 Hs
GARRO, ADRIANA DEOLINDA	Prof. Co-Responsable	P.Asoc Exc	40 Hs
ROJAS, SEBASTIAN	Responsable de Práctico	JTP Simp	10 Hs
STEGE, WALTER PEDRO	Auxiliar de Práctico	A.1ra Simp	10 Hs

III - Características del Curso

Credito Horario Semanal				
Teórico/Práctico	Teóricas	Prácticas de Aula	Práct. de lab/ camp/ Resid/ PIP, etc.	Total
Hs	4 Hs	Hs	3 Hs	7 Hs

Tipificación	Periodo
B - Teoria con prácticas de aula y laboratorio	1° Cuatrimestre

Duración			
Desde	Hasta	Cantidad de Semanas	Cantidad de Horas
11/03/2026	23/06/2026	15	105

IV - Fundamentación

El extraordinario avance que tiene la Industria Farmacéutica en el descubrimiento y desarrollo de fármacos demanda que los profesionales farmacéuticos posean los conocimientos teóricos y además una práctica, al menos, mínima en las distintas temáticas de la Química Medicinal, para que puedan incorporarse en industrias de éste tipo. La formación del profesional farmacéutico en este tipo de disciplina es indispensable también para su desempeño tanto en áreas de la Farmacia Clínica, como de Farmacia Hospitalaria y Oficina de Farmacia.

Se pretende que este curso tenga una dimensión operativa, es decir, que los futuros farmacéuticos adquieran fundamentos, tácticas, métodos, bibliografía, etc., concretos para que puedan ser utilizados en su futura actividad

V - Objetivos / Resultados de Aprendizaje

En el plano del conocimiento:

1. Que los/las estudiantes adquieran una consistente formación en los distintos aspectos que conforman la Química Medicinal.
2. Que los/las estudiantes adquieran herramientas teórico-prácticas tales que le permitan un eficiente desenvolvimiento en su futura carrera profesional.
3. Que los/las estudiantes sean capaces de plantear y analizar posibles situaciones con sus correspondientes soluciones y adquieran además la capacidad de extrapolación a problemas que se les puedan presentar en su carrera profesional.

En el plano actitudinal:

1. Fomentar la racionalidad como punto de partida de cualquier cuestionamiento.
2. Fomentar la capacidad crítica para la consideración de problemas de la profesión farmacéutica, en general, y de problemas de Química Medicinal en particular.

Uso de herramientas informáticas: dada la naturaleza de algunos de los tópicos abordados en la asignatura, los estudiantes aprenderán a utilizar programas especializados en la construcción de moléculas 2D y 3D así como también visualizadores (Chimera, Pymol, etc) y programas sencillos de cálculos. Todos los programas utilizados son software libre y gratuito además de servidores on line en algunos casos. Para la preparación de informes y exposiciones se utilizarán programas de uso común como procesadores de texto y programas que permiten crear presentaciones.

VI - Contenidos

TEMA 1: CONCEPTOS GENERALES DE QUÍMICA MEDICINAL. MECANISMO DE ACCIÓN DE DROGAS A NIVEL MOLECULAR.

Química Medicinal, definiciones y objetivos. Relación con otros campos de la Química y la Biología. Dónde, cómo y por qué actúan las drogas. Sitio de unión, grupos de unión, regiones de unión. Uniones intermoleculares. Aspectos termodinámicos de la unión Droga-Receptor. Teorías que explican la formación del complejo Droga-Receptor. Modelo de la llave-cerradura. El concepto de unión inducida de Koshland. Modelo de los dos estados. Modelo de la selección conformacional. Enzimas como blancos moleculares. Inhibición reversible e irreversible. Sustratos suicidas. Receptores como blancos moleculares. Diseño de agonistas y antagonistas. Otros blancos moleculares. Aspectos estereoquímicos de la interacción droga-receptor.

TEMA 2: ETAPAS EN EL DESARROLLO DE NUEVAS DROGAS. ESTRATEGIAS PARA LA BÚSQUEDA DE NUEVOS COMPUESTOS LÍDERES.

Para qué enfermedad se busca una droga. Selección del blanco molecular para una droga. Importancia de la selectividad y especificidad. Criterios para seleccionar el bioensayo (in vitro – in vivo). Concepto de Hits y compuestos líderes. Diferencias entre el Hit y el líder. Concepto de espacio químico. Propiedades que debe tener un compuesto líder. Distintas estrategias para la búsqueda de nuevos hits o compuestos líderes. Enfoque fenotípico del desarrollo de nuevas drogas. El acceso a los medicamentos como un derecho humano. Enfermedades desatendidas: organizaciones humanitarias (DNDi).

TEMA 3: DEL HIT AL LÍDER. OPTIMIZACIÓN DE LAS PROPIEDADES FARMACODINÁMICAS

Identificación del farmacóforo de una droga. Modalidades del procedimiento de modificación molecular. Modificación de sustituyentes alquílicos. Variación molecular en series homólogas: vinílogos, y benzólogos. Concepto de isosterismo: isósteros clásicos y no-clásicos. Bioisósteros y variaciones moleculares basadas en reemplazos isostéricos. Simplificación molecular. La importancia de la flexibilidad molecular y los bloqueos estéricos. Espacio farmacológico. Carácter de fármaco (drug-likeness). Compuestos con características similares a fármacos (drug-like). Regla de Lipinski (rule of five). Espacio del target. Macromoléculas con capacidad de ser moduladas por drogas (Druggability). Caso de estudio: El desarrollo de Cimetidina.

TEMA 4: OPTIMIZACIÓN DE LAS PROPIEDADES FARMACOCINÉTICAS DE UNA DROGA.

Aspectos farmacocinéticos importantes para el desarrollo de una droga. Optimización de las propiedades hidrofílicas/hidrofóbicas. Modificaciones para cambiar la polaridad de las drogas. Variación del pKa. Aumento de la resistencia a la degradación química y enzimática. Disminución de la resistencia al metabolismo. Reducción de la toxicidad. Prodrogas y bioprecusores. Aplicaciones prácticas de prodrogas. Alianzas de drogas y sinergismo.

TEMA 5: Métodos directos para el diseño de drogas. Modelado Molecular. Acoplamiento molecular (Docking). Distintos tipos de acoplamiento: rígidos y flexibles. Definición de campo de fuerza. Generación de conformaciones. Puntuación de los modos de unión. El uso de grillas precalculadas. Clusterización. Análisis de los resultados.

Métodos indirectos para el diseño de nuevas drogas. Relación estructura-actividad cuantitativa (QSAR). Modelo matemático. Descriptores o propiedades: Hidrofobicidad de la molécula (P). Coeficiente de hidrofobicidad de los sustituyentes. Factores electrónicos. Constante de Hammett. Factores estéricos. Constante de Taft. Limitaciones del QSAR tradicional.

TEMA 6: SÍNTESIS QUÍMICA EN QUÍMICA MEDICINAL. Planificación de síntesis de fármacos. Síntesis total. Síntesis parcial o semisíntesis. Síntesis lineal y convergente. Química Combinatoria. Síntesis de Mezclas y en paralelo. Síntesis en fase sólida (requerimientos). Preparación de bibliotecas. Tipos de bibliotecas combinatorias. Generación de quimiotecas (esqueletos o andamiajes estructurales). Reglas generales de la química combinatoria.

TEMA 7: ASPECTOS ECONÓMICOS Y LEGALES DEL DESARROLLO DE NUEVAS DROGAS.

ASPECTOS LEGALES: Del descubrimiento a la factibilidad del mercado. Elementos presentes en el desarrollo. Estudios

Preclínicos: toxicidad, farmacología, formulación y pruebas de estabilidad. Caso de estudio. Marcadores isotópicos. Desarrollo de una droga: riesgos y etapas. Aspectos químicos del proceso de desarrollo. Aspectos a considerar en la elección de los compuestos candidatos. Desarrollo farmacéutico industrial y médico económico. Estudios clínicos de fase I-IV. Aspectos éticos. Propiedad intelectual.

FARMACOECONOMÍA: Nociones básicas. Tipos de evaluaciones económicas. Etapas de la evaluación económica. Árboles de decisión. Medición de efectos: Número necesario a tratar, AVAC/QALY.

TEMA 8: COMPUESTOS DE INTERÉS I: ANALGÉSICOS OPIOIDES. El principio activo: morfina. Estructura y propiedades. Relación estructura-actividad. Receptores opioides (el blanco molecular de morfina). Morfina: Farmacodinámica y farmacocinética. Análogos de morfina. Simplificación molecular y rigidización. Péptidos opioides endógenos. Diseño de drogas (opioides analgésicos). Heroína y el factor hidrofóbico. Encefalinas, los opioides propios del cuerpo.

TEMA 9: COMPUESTOS DE INTERÉS II . AGENTES ANTICANCERÍGENOS

Ácidos Nucleicos como blancos moleculares para el desarrollo de nuevas drogas. Cáncer, definiciones y causas. Principales agentes anticancerígenos. Drogas que actúan directamente sobre los ácidos nucleicos. Agentes alquilantes. Drogas que actúan sobre enzimas

(antimetabolitos). Inhibidores de dihidrofolato reductasa y timidilato sintetasa. Inhibidores de los mecanismos de señalización celular. Inhibición de farnesil transferasa y de proteínas quinasas. Anticuerpos monoclonales conjugados. Caso de aplicación: El diseño de novo de inhibidores de timidilato sintetasa.

TEMA 10: COMPUESTOS DE INTERÉS III. AGENTES ANTICOLINESTERÁSICOS.

Acetilcolinesterasa. Drogas anticolinesterásicas. Efecto de los anticolinesterásicos. Estructura de la enzima. Descripción del sitio activo de la enzima. Drogas anticolinesterásicas. Carbamatos. Compuestos organofosforados. Antídoto de organofosforados. Inhibidores de colinesterasas. Agentes de acción dual. Agentes multitarget.

TEMA 11 COMPUESTOS DE INTERÉS IV. AGENTES ANTIBACTERIANOS. Mecanismo de acción de las sulfonamidas. Mecanismo de acción de las penicilinas. Resistencia a las penicilinas. Análogos de penicilinas. Antibacterianos que impiden la síntesis proteica. Agentes que actúan en la transcripción y replicación del ácido nucleico. Agentes que actúan por otros mecanismos de acción. Resistencia a las drogas.

TEMA 12: COMPUESTOS DE INTERÉS V: AGENTES ANTIVIRALES. Drogas antivirales. Principios generales. Drogas antivirales usadas contra virus ADN. Inhibidores de la ADN polimerasa viral. Drogas antivirales usadas contra virus ARN. HIV. Inhibidores de la transcriptasa reversa viral. Inhibidores de proteasa. Inhibidores de la integrasa.

Virus de la influenza. Disruptores de canales iónicos. Adamantanos. Inhibidores de neuraminidasa. Virus de la hepatitis C. Agentes antivirales de amplio espectro.

VII - Plan de Trabajos Prácticos

Trabajo Práctico N° 1: Estudio de la unión en los complejos droga-receptor

Trabajo Práctico N° 2: Descubrimiento de drogas. Diseño y Desarrollo.

Trabajo Práctico N° 3: Modificaciones para mejorar los aspectos farmacodinámicos de compuestos líderes.

Trabajo Práctico N°4: Modelado molecular I

Trabajo Práctico N°5: Relación estructura-actividad cuantitativa (QSAR).

Trabajo Práctico N° 6: Modificaciones para optimizar los aspectos farmacocinéticos de compuestos líderes. Profármacos.

Trabajo Práctico N°7: Modelado molecular II. AlphaFold.

Trabajo Práctico N° 8: Aspectos económicos y legales del desarrollo de nuevas drogas.

Trabajo Práctico N° 9: Estudio de la toxicidad aguda de fármacos.

VIII - Regimen de Aprobación

Para alcanzar la regularidad de la materia los estudiantes deberán: aprobar el 100% de los trabajos prácticos programados. Los estudiantes deberán aprobar, al menos el 75% de los TPs en una primera instancia y el resto podrán aprobarlos en una segunda instancia de recuperación.

La evaluación de los conocimientos adquiridos se llevará a cabo mediante 3 evaluaciones parciales siguiendo lo reglamentado en las ordenanzas 13/03C, 32/14CS y 4/15CD.

La aprobación final de la asignatura se realizará mediante una evaluación final oral o escrita (según lo estipule el tribunal

examinador) que versará sobre los contenidos adquiridos tanto de TPs como teóricos. La misma se llevará a cabo en los turnos

de exámenes previamente fijados por las autoridades universitarias.

Para promocionar la materia el/la estudiante deberá aprobar tres evaluaciones parciales en primera instancia con nota igual o superior a ocho sin posibilidad de recuperación y un examen integrador modalidad oral.

PROGRAMA PARA EXAMEN FINAL

BOLILLA 1 TEMAS 1 Y 7

BOLILLA 2 TEMAS 2 Y 8

BOLILLA 3 TEMAS 3 Y 9

BOLILLA 4 TEMAS 4 Y 10

BOLILLA 5 TEMAS 5 Y 11

BOLILLA 6 TEMAS 6 Y 12

IX - Bibliografía Básica

[1] Graham. L. Patrick An Introduction to Medicinal Chemistry Fifth edition. Oxford University Press Inc. New York, 2013.

[2] Wermuth, C.G. The Practice of Medicinal Chemistry. Elsevier Ltd. 2015.

[3] Guías metodológicas: Puig-Junoy J., Pinto-Prades J. L., Ortún-Rubio V. El análisis costo beneficio en sanidad. Atención primaria 2001; 27:422-427

[4] Guías metodológicas: Sacristán J.A., Ortún V., Rovira J., Prieto L., García-Alonso F. Evaluación económica en medicina. Med Clin (Barc) 2004; 122:379-382

[5] Ortega Eslava, A., & Fraga Fuentes, M. D. (2014). Farmacia Hospitalaria y Farmacoeconomía: 100 Preguntas más frecuentes. Editores Médicos, S.A.

X - Bibliografía Complementaria

XI - Resumen de Objetivos

XII - Resumen del Programa

TEMA 1: CONCEPTOS GENERALES DE QUÍMICA MEDICINAL. MECANISMO DE ACCIÓN DE DROGAS A NIVEL MOLECULAR

TEMA 2: ETAPAS EN EL DESARROLLO DE NUEVAS DROGAS. ESTRATEGIAS PARA LA BÚSQUEDA DE NUEVOS COMPUESTOS LÍDERES.

TEMA 3: DEL HIT AL LÍDER. OPTIMIZACIÓN DE LAS PROPIEDADES FARMACODINÁMICAS.

TEMA 4: OPTIMIZACIÓN DE LAS PROPIEDADES FARMACOCINÉTICAS DE UNA DROGA.

TEMA 5: MÉTODOS DIRECTOS PARA EL DISEÑO DE DROGAS

TEMA 6: SÍNTESIS QUÍMICA EN QUÍMICA MEDICINAL.

TEMA 7: ASPECTOS ECONÓMICOS Y LEGALES DEL DESARROLLO DE NUEVAS DROGAS.

TEMA 8: COMPUESTOS DE INTERÉS I: ANALGÉSICOS OPIOIDES.

TEMA 9: COMPUESTOS DE INTERÉS II . AGENTES ANTICANCERÍGENOS

TEMA 10: COMPUESTOS DE INTERÉS III. AGENTES ANTICOLINESTERÁSICOS.

TEMA 11: COMPUESTOS DE INTERÉS IV. AGENTES ANTIBACTERIANOS.

TEMA 12: COMPUESTOS DE INTERÉS V: AGENTES ANTIVIRALES.

XIII - Imprevistos

XIV - Otros

Herramientas informáticas: Los/las estudiantes utilizarán durante la cursada de esta asignatura diferentes herramientas informáticas, algunas de ellas de uso general como editores de texto, programas para organizar presentaciones, etc, y otros, programas específicos de la química computacional como visualizadores, programas para dibujar estructuras 2D y 3D, entre otros.

ELEVACIÓN y APROBACIÓN DE ESTE PROGRAMA	
	Profesor Responsable
Firma:	
Aclaración:	
Fecha:	