

Facultad de Ciencias

Grado en Química

GUÍA DOCENTE DE LA ASIGNATURA :

Sustancias Bioactivas
(2018 - 2019)

1. Datos descriptivos de la asignatura

Asignatura: Sustancias Bioactivas	Código: 329170904
<ul style="list-style-type: none">- Centro: Facultad de Ciencias- Lugar de impartición: Facultad de Ciencias- Titulación: Grado en Química- Plan de Estudios: 2009 (Publicado en 2009-11-25)- Rama de conocimiento: Ciencias- Itinerario / Intensificación:- Departamento/s:<ul style="list-style-type: none">QuímicaQuímica Orgánica- Área/s de conocimiento:<ul style="list-style-type: none">Química AnalíticaQuímica FísicaQuímica InorgánicaQuímica Orgánica- Curso: 4- Carácter: Optativa- Duración: Anual- Créditos ECTS: 9,0- Modalidad de impartición: Presencial- Horario: Enlace al horario- Dirección web de la asignatura: http://www.campusvirtual.ull.es- Idioma: Castellano e Inglés (0,3 ECTS en Inglés)	

2. Requisitos para cursar la asignatura

Requisitos previos recomendados: Ampliación de Química Física, Química de la Coordinación, Ampliación de Química Orgánica, Ampliación de Química Analítica, Análisis Instrumental, Métodos de Separación, Experimentación Avanzada en Química Orgánica

3. Profesorado que imparte la asignatura

Profesor/a Coordinador/a: PEDRO FRANCISCO MARTIN ZARZA
<ul style="list-style-type: none">- Grupo: 1, PA101, PX101, TU101- Departamento: Química- Área de conocimiento: Química Inorgánica
Tutorías Primer cuatrimestre:

Horario:

Lunes 16:30 a 18:30 h; martes, miércoles y jueves de 16:00 a 17:00 h; viernes de 12:00 a 13:00 h.

Tutorías Segundo cuatrimestre:

Horario:

Lunes 16:30 a 18:30 h; martes, miércoles y jueves de 16:00 a 17:00 h; viernes de 12:00 a 13:00 h.

- Teléfono (despacho/tutoría): **922845257**
- Correo electrónico: **pfmartin@ull.edu.es**
- Web docente: **<http://www.campusvirtual.ull.es>**

Lugar:

Lunes, martes, miércoles y jueves: Aula de usos múltiples del Área de Química Inorgánica. Segunda planta del Edificio anexo de la Sección de Química. Viernes: Despacho 6 de la U.D. de Química Inorgánica, Departamento de Química, Sección de Farmacia

Lugar:

Lunes, martes, miércoles y jueves: Aula de usos múltiples del Área de Química Inorgánica. Segunda planta del Edificio anexo de la Sección de Química. Viernes: Despacho 6 de la U.D. de Química Inorgánica, Departamento de Química, Sección de Farmacia

Profesor/a: GUILLERMO GONZALEZ HERNANDEZ

- Grupo: **1, PA101, PX101, TU101**
- Departamento: **Química**
- Área de conocimiento: **Química Analítica**

Tutorías Primer cuatrimestre:

Horario:

Martes, miércoles y jueves de 16:00 a 18:00 h

Lugar:

Despacho 18, Unidad Departamental de Química Analítica, 2ª planta, Sección de Química.

Tutorías Segundo cuatrimestre:

Horario:

Martes, miércoles y jueves de 16:00 a 18:00 h

Lugar:

Despacho 18, Unidad Departamental de Química Analítica, 2ª planta, Sección de Química.

- Teléfono (despacho/tutoría): **922318047**
- Correo electrónico: **gglezh@ull.es**
- Web docente: **<http://www.campusvirtual.ull.es>**

Profesor/a: MARIA PILAR ENCARNACION CARRO REGLERO

- Grupo: **1, PA101, PX101, TU101**
- Departamento: **Química**
- Área de conocimiento: **Química Física**

Tutorías Primer cuatrimestre:

Horario:

Martes, miércoles y jueves de 12:00 a 14:00 h

Lugar:

Despacho 17, Unidad Departamental de Química Física, 3ª planta, Sección de Química

Tutorías Segundo cuatrimestre:

Horario:

Martes, miércoles y jueves de 12:00 a 14:00 h

Lugar:

Despacho 17, Unidad Departamental de Química Física, 3ª planta, Sección de Química

- Teléfono (despacho/tutoría): **922318031**
- Correo electrónico: **pcarro@ull.es**
- Web docente: **<http://www.campusvirtual.ull.es>**

Profesor/a: ANA MARIA ESTEVEZ BRAUN

- Grupo: **1, PA101, PX101, TU101**
- Departamento: **Química Orgánica**
- Área de conocimiento: **Química Orgánica**

Tutorías Primer cuatrimestre:

Horario:

Lunes, martes y jueves de 12:00 a 14:00 h

Lugar:

Despacho, Planta baja Instituto Universitario de Bio-Orgánica Antonio González.

Tutorías Segundo cuatrimestre:

Horario:

Lunes, martes y jueves de 12:00 a 14:00 h

Lugar:

Despacho, Planta baja Instituto Universitario de Bio-Orgánica Antonio González.

- Teléfono (despacho/tutoría): **922318576**
- Correo electrónico: **aestebra@ull.es**
- Web docente: **<http://www.campusvirtual.ull.es>**

4. Contextualización de la asignatura en el plan de estudio

Bloque formativo al que pertenece la asignatura: **Materias Optativas**
Perfil profesional:

5. Competencias

Optativas

OP03 - Estudio de la química de sustancias bioactivas.

General

CG01 - Capacidad de análisis y síntesis

CG02 - Capacidad de organización y planificación.

CG10 - Razonamiento crítico

CG12 - Aprendizaje autónomo

6. Contenidos de la asignatura

Contenidos teóricos y prácticos de la asignatura

Contenidos teóricos:

Bloque 1 (Profesora Pilar Carro Reglero; del 26 de septiembre al 17 de octubre)

Tema 1. Bioenergética. Conversión de la energía en los sistemas vivos. Trabajo y calor. Liberación de energía libre. Alimento y reservas de energía. Energía de Gibbs de ensamblado de proteínas y membranas biológicas. Transiciones de fase en membranas biológicas. Fotosíntesis. papel del ATP como transportador de energía.

Tema 2. Transporte a través de membranas biológicas. Transporte activo y pasivo. Potencial de membrana. Canales iónicos y bombas. Efectos cinéticos y de control: cinética del transporte iónico. Transporte de electrones. Cinética enzimática.

Tema 3. Fotoquímica y fotobiología. Efectos biológicos de la radiación. Bases del efecto general de las radiaciones ionizantes sobre la materia viva: acción directa e indirecta.

Bloque 2 (Profesor Pedro Martín Zarza; del 24 de octubre al 9 de noviembre)

Tema 4. Papel de los iones metálicos en el sostenimiento de la vida. Biodisponibilidad y accesibilidad de los elementos. Asimilación de los iones metálicos. Esencialidad. Curvas de dosis. Funciones biológicas de algunos elementos representativos. Interacciones metal-biomolécula: estado entáxico.

Tema 5. Los metales y su papel en la aparición de ciertas patologías. Introducción. Problemas asociados con la incorrecta distribución de los elementos esenciales. Suplementación de los elementos. Papel de los metales en el estrés oxidante (EO). Los metales y su papel en algunas enfermedades neurodegenerativas. Remoción de los elementos metálicos: quelatoterapias.

Tema 6. Los metales y sus aplicaciones farmacéuticas y biomédicas. Terapias basadas en el uso de compuestos metálicos para el tratamiento de diferentes patologías. Aplicaciones de compuestos inorgánicos en radio-farmacia y radio-imagen. Agentes de imagen no radiactivos en la práctica clínica basados en compuestos inorgánicos.

Bloque 3 (Profesor Guillermo González Hernández; 21 de noviembre al 12 de diciembre)

Tema 7. El proceso analítico en la cuantificación de sustancias bioactivas. Sustancias bioactivas. identificación del problema analítico. Sustancias bioactivas en muestras agroalimentarias. Muestras de fluidos y tejidos biológicos: el procedimiento preanalítico en la determinación de parámetros químico clínicos. Tratamiento de residuos en el laboratorio químico clínico. Informe de resultados químico clínicos.

Tema 8. Determinación de sustancias bioactivas. Metodologías analíticas. Métodos analíticos de screening. Métodos enzimáticos de análisis químico. Inmunoanálisis. Automatización y miniaturización de sistemas analíticos usados en clínica. Pruebas en el lugar de atención al paciente (PDLA) y su conectividad al laboratorio. Identificación y cuantificación de sustancias bioactivas en muestras agroalimentarias.

Tema 9. Análisis de drogas, tóxicos y fármacos. Alcohol en sangre. Análisis de alcaloides y otras drogas naturales. Drogas

de diseño. Determinación de sustancias bioactivas del humo del tabaco. Determinación de metales tóxicos y agentes metaloterapéuticos. Análisis de fármacos. Monitoreo de fármacos en fluidos biológicos. Análisis de radiofármacos. Análisis forense.

Bloque 4 (Profesora Ana María Estévez Braun; del 14 de diciembre al 18 de enero)

Tema 10. Estrategias en la búsqueda de nuevos fármacos. Descubrimiento de cabezas de serie: screening al azar, screening dirigido. Los productos naturales como fuente de nuevos fármacos. Modificación de cabezas de serie: identificación del farmacóforo, modificaciones estructurales para mejorar la potencia, el índice terapéutico y la biodisponibilidad oral.

Relaciones estructura-actividad. Aproximación racional al diseño de fármaco. Estudio del metabolismo de fármacos.

Tema 11. Tipos de dianas biológicas. Interacciones entre los fármacos y sus dianas biológicas: interacciones covalentes, interacciones iónicas, interacciones dipolares, interacciones por enlace de hidrógeno, interacciones de Van der Waals, interacciones hidrofóbicas, interacciones por complejo de transferencia de carga. Métodos de determinación de interacciones ligando-receptor: difracción de rayos X y RMN.

Tema 12. Métodos computacionales en el diseño de fármacos. Métodos indirectos. Relaciones cuantitativas entre la estructura química y la actividad biológica. Métodos usados para correlacionar parámetros fisicoquímicos con actividad biológica: análisis de Hansch. Modelo de Free-Wilson. Métodos directos. Modelización molecular: docking.

Contenidos prácticos:

- i) Preparación del anestésico local benzocaína.
- ii) Determinación de vitamina C en zumos y orina.
- iii) Determinación de ácido rosmarínico en romero (esta clase práctica puede ser sustituida por Prácticas de Campo).
- iv) Arcoíris del zumo de tomate. Espectros VIS-UV del licopeno y caroteno.
- v) Simulación computacional del espectro VIS-UV del licopeno y visualización de la biomolécula opsina con el software VMD.
- vi) Síntesis de complejos de cobalto (III) como mimetizadores del cofactor de la vitamina B12.
- vii) Preparación de complejos de cobre(II) y níquel (II) con L-penicilamina.

Actividades a desarrollar en otro idioma

- Profesores: Pilar Carro Reglero, Pedro Martín Zarza, Ana María Estévez Braun y Guillermo González Hernández.
- La bibliografía que se facilita a los alumnos para la preparación de exposiciones orales, informes de prácticas y seminarios estará en inglés.
- Dentro de cada bloque, una parte de las presentaciones utilizadas por el profesor con diapositivas durante las clases de teoría estará en inglés.

7. Metodología y volumen de trabajo del estudiante

Descripción

La metodología docente de la asignatura contempla las siguientes actividades formativas:

- Clases teóricas. En ellas se explican cada uno de los aspectos básicos del temario transmitiendo los conocimientos necesarios que le brindarán al alumno una información organizada sobre los distintos conceptos tratados en la asignatura. Se hará uso de diferentes recursos didácticos, como la pizarra, que representará el recurso más utilizado. Como apoyo a éste y para presentar una información más amplia se utilizará el cañón de proyecciones con programas apropiados de presentación. En el aula virtual se pondrán a disposición los ficheros con las presentaciones y otro material suplementario necesario para el seguimiento de la asignatura.
- Clases de problemas. Se resolverán problemas numéricos relacionados con aspectos tratados en las clases de teoría. En

el aula virtual de la asignatura se pondrá a disposición de los alumnos colecciones de ejercicios y problemas.

- Seminarios. Actividades monográficas supervisadas con participación compartida que se dedicarán a la discusión y desarrollo de temas programados para complementar el proceso de aprendizaje del alumno.
- Tutorías. Se organizarán en grupos reducidos de alumnos, de acuerdo con el calendario propuesto por la Facultad. En ellas, se supervisará el proceso de aprendizaje mediante la revisión y discusión de material bibliográfico y lecturas recomendadas en las clases de teoría y en los seminarios. También se resolverán y discutirán todas las dudas que hayan podido surgir tanto en las clases de teoría como en las clases de problemas.
- Clases de laboratorio. Estas representan una parte importante en la adquisición de destrezas en el manejo de técnicas de laboratorio. Se realizarán en los laboratorio/s asignado/s de acuerdo con el calendario propuesto por la Sección de Química.

Actividades formativas en créditos ECTS, su metodología de enseñanza-aprendizaje y su relación con las competencias que debe adquirir el estudiante

Actividades formativas	Horas presenciales	Horas de trabajo autónomo	Total horas	Relación con competencias
Clases teóricas	36,00	90,00	126,0	[OP03], [CG01], [CG10]
Clases prácticas (aula / sala de demostraciones / prácticas laboratorio)	30,00	13,00	43,0	[CG01], [CG02], [CG10], [CG12]
Realización de seminarios u otras actividades complementarias	8,00	8,00	16,0	[CG01], [CG02], [CG10], [CG12]
Realización de exámenes	4,00	8,00	12,0	[OP03], [CG01], [CG10], [CG12]
Asistencia a tutorías	8,00	8,00	16,0	[CG01], [CG10], [CG12]
Exposición oral	4,00	8,00	12,0	[OP03], [CG02], [CG10]
Total horas	90,0	135,0	225,0	
		Total ECTS	9,00	

8. Bibliografía / Recursos

Bibliografía Básica

- Atkins P, de Paula J, Physical Chemistry for the Life Science, ISBN: 978-0-1992-8095-7, (2006).
- Bertini, I. (Eds); - Biological Inorganic Chemistry: structure and reactivity; University Science Books; Sausalito, CA.;ISBN:978-1-891389-43-6; 2007.
- Mikkelsen, S.R. Química bioanalítica: métodos y teoría analítica para el laboratorio de biología molecular, farmacia y

bioquímica. Universidad de Buenos Aires. ISBN: 978-950-23-1769-4, 2011.
- Gareth Thomas. Medicinal Chemistry. An Introduction. 2º edición, Ed. Wiley. England, 2011.

Bibliografía Complementaria

- David Van Vranken, Gregory A. Weiss. Introduction to Bioorganic Chemistry and Chemical Biology. Ed. Taylor & Francis, CRC Press and Garland Science, 2013.
- The Practice of Medicinal Chemistry. Ed. Wermuth, Camille Georges. 3º edición, Ed. Academic Press, Elsevier Ltd., London, 2008.
- Colegate, Steven M. Molyneux, Russell J. Bioactive natural products: detection, isolation, and structural determination. Ed. Boca Raton: Taylor and Francis, 2008.
- Harwood, L.M.; Percy, J.M.; Moody, C.J. Experimental Organic Chemistry: Standard and Microscale. Blackwell Scientific Publications, 2003.
- Haynie, D. T. "Biological Thermodynamics". Cambridge University Press, 2001.
- Tinoco, I; Sauer, K; Wang Wang J and Puglisi J. "Physical Chemistry. Principles and Applications in Biological Sciences". Fourth Edition. Prentice Hall college 2002.
- Christian, G.D. Química analítica. McGraw-Hill Interamericana. ISBN: 978-970-10-7234-9, 2009.
- Higson, S.P.J. Química analítica. McGraw-Hill Interamericana. ISBN: 978-970-10-6152-7, 2007.
- Cámara, C., Fernández, P., Martín-Esteban, A., Pérez-Conde, C., Vidar, M. Toma y tratamiento de muestras. Ed. Síntesis, 2002
- Guder, W. G., Narayanan, S. Clinical samples: from the patient to the laboratory. Ed. Wiley-VCH, 2009.
- Torralba, S., Gasol, R. M. Operaciones básicas de laboratorio. Ed. Altamar, 2009
- Skoog, D. A., Holler, F. J., Nieman, T. A. Principios de análisis instrumental. Ed. McGraw-Hill/Interamericana, 2001
- Valcárcel, M., Cárdenas, M. S. Automatización y miniaturización en química analítica. Ed. Springer-Verlag Ibérica, 2000
- Mauri, A.; Llobat, M.; Herráez, R. Laboratorio de análisis instrumental. Ed. PUV/Reverté, 2010
- Delgado, A.; Minguillón C.; Joglar, J. Introducción a la Química Terapéutica, Díaz de Santos 2003
- Silverman, R.B.; The Organic Chemistry of Drug Design and Drug Action, Elsevier Academic Press 2004
- Harwood, L.M.; Percy, J.M.; Moody, C.J. Experimental Organic Chemistry: Standart and Microscale. Blackwell Scientific Publications 2003.
- Dabrowiak, J.C., Metals in Medicine, Wiley, ISBN: 978-0-470-68197-8, 2009.

Otros Recursos

- Protein Data Bank: <http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>
- MDL Information Services: http://www.mdll.com/downloads/search_by_si/si_chemistry.jsp
- Programas para visualización molecular: <http://www.umass.edu/molvis/martz/index.htm>
- Bioinorganic chemistry and related sites on www: http://metallo.scripps.edu/PROMISE/SITES_LIST.html
- Temas de biofísica: <http://docencia.izt.uam.mx/docencia/alva/ueabiofisica.html>
- Proteínas de membrana: <http://blanco.biomol.uci.edu/>
- Canales iónicos: <http://www.csun.edu/~hcchm001/wwwatp2>.
- Biomoléculas: <http://www.oup.com/uk/orc/bin/9780199564286/01student/biomolecules/>

9. Sistema de evaluación y calificación

Descripción

La calificación de la convocatoria de junio se basará en la evaluación continua que se valorará de acuerdo con los siguientes criterios:

- a) Participación en seminarios, tutorías y otras actividades: 20%
- b) Prácticas de laboratorio e informes de prácticas: 30%
- c) Prueba final escrita: 50%

Para poder aprobar la asignatura en esta convocatoria, el alumnado deberá:

- 1) tener un porcentaje de asistencia, como mínimo, del 80%, en todas las actividades del curso (clases magistrales, seminarios, tutorías y clases prácticas en el laboratorio).
- 2) obtener en la suma de las calificaciones de los apartados a) y b) una nota mínima de 3,5 (sobre 10).
- 3) obtener una calificación mínima de 3,5 (sobre 10) en la prueba escrita final.

En el caso de no cumplirse el apartado 1) la prueba final será calificada con un 0,0. Si no se cumple el criterio 2) o 3) la calificación final será la menor de los apartados b) y c) sobre 10. Además, deberá haber obtenido una calificación mínima de 5,0 (sobre 10) en el apartado b) de la evaluación continua. En caso contrario deberá entregar antes de la fecha del examen de la convocatoria un nuevo Informe de las clases de prácticas de laboratorio que será corregido y en el deberá obtener una calificación mínima de 5,0 (sobre 10).

Las tareas, cuestionarios y trabajos asignados en las clases de teoría, seminarios, tutorías y clases prácticas de laboratorio que no sean entregados, se puntuarán con cero.

En el resto de las convocatorias la evaluación consistirá en un examen teórico-práctico sobre los contenidos de la asignatura y la calificación final será la correspondiente a dicho examen. En el supuesto de que se hubiesen superado las prácticas de laboratorio en la evaluación continua, se tendrá en cuenta en la calificación final.

Estrategia Evaluativa

Tipo de prueba	Competencias	Criterios	Ponderación
Pruebas de desarrollo	[OP03], [CG01], [CG10], [CG12]	Se valorará el dominio de los conocimientos teóricos y operativos de la asignatura	50 %
Informes memorias de prácticas	[CG01], [CG02], [CG10], [CG12]	Conocimiento de las técnicas y las metodologías utilizadas, así como de la interpretación de los resultados obtenidos	20 %
Técnicas de observación	[CG02], [CG10]	Participación activa en clase, seminarios y tutorías. En el laboratorio se valorará: destreza, orden y limpieza.	15 %
Exposición Oral	[OP03], [CG01], [CG12]	Se valorará las exposiciones: - trabajos asignados en los seminarios - presentación de los resultados del laboratorio	15 %

10. Resultados de Aprendizaje

Describir los procesos extracelulares e intracelulares implicados en la acción de los fármacos.

Diseñar una estrategia sintética para un compuesto cabeza de serie. Interpretar los requisitos estructurales mínimos de un compuesto cabeza de serie e identificar la relación estructura-actividad.

Aplicar los métodos de análisis y caracterización de un compuesto activo.
 Manejar las principales técnicas aplicables al desarrollo de nuevos fármacos a partir de un compuesto cabeza de serie.
 Describir las diferentes metodologías analíticas empleadas en el análisis químico de fármacos y de parámetros clínicos.
 Discriminar los grupos de sustancias bioactivas.
 Aplicar las distintas metodologías de extracción, aislamiento y cuantificación de las sustancias bioactivas presentes en fluidos biológicos.
 Explicar los métodos de síntesis de grupos de fármacos estructuralmente relacionados incidiendo en la relación estructura-actividad.

11. Cronograma / calendario de la asignatura

Descripción

Para estar mejor informado sobre el calendario de las diferentes actividades de la asignatura se debe consultar el Horario por semana del curso.

<http://www.ull.es/view/centros/quimica/Horarios/es> (Química)

En este horario se especifica la fecha exacta en que tienen lugar las diferentes actividades lo que permitirá al alumno localizar las principales actividades que contribuyen de manera especial a la evaluación continua (seminarios, tutorías, prácticas, ...)

La fecha en que se realizarán las diferentes pruebas en las diferentes convocatorias se puede consultar en:

http://www.ull.es/view/centros/quimica/Calendario_de_exámenes/es (Química)

Por último, destacar que la distribución de los temas por semana en el cronograma es orientativa, pudiendo sufrir cambios según las necesidades de organización docente.

Primer cuatrimestre					
Semana	Temas	Actividades de enseñanza aprendizaje	Horas de trabajo presencial	Horas de trabajo autónomo	Total
Semana 1:	1 y 2	Clases teoricas (3)	3.00	6.00	9.00
Semana 2:	2 y 3	Clases teoricas (3) Tutorias (1)	4.00	6.00	10.00
Semana 3:	3	Clases teoricas (2) Tutorias (1)	3.00	11.00	14.00
Semana 4:	3	Clases teoricas (1) Seminarios (2)	3.00	9.50	12.50
Semana 5:	4	Clases teoricas (4)	4.00	6.00	10.00
Semana 6:	5	Clases teoricas (2) Tutorias (1)	3.00	8.00	11.00
Semana 7:	5 y 6	Clases teoricas (3) Tutorias (1)	4.00	7.50	11.50

Semana 8:	6	Seminario (2)	2.00	6.00	8.00
Semana 9:	7	Clases teoricas (3) Tutorias (1)	4.00	8.00	12.00
Semana 10:	7 y 8	Clases teoricas (3) Seminario (1)	4.00	6.00	10.00
Semana 11:	8 y 9	Clases teoricas (2)	2.00	7.50	9.50
Semana 12:	9 y 10	Clases teoricas (2) Tutorias (1) Seminario (1)	4.00	6.00	10.00
Semana 13:	10	Clases teoricas (3) Seminario (1)	4.00	7.00	11.00
Semana 14:	11 y 12	Clases teoricas (1)	1.00	3.50	4.50
Semana 15:	12	Clases teoricas (4) Tutorias (2) Seminario (1)	7.00	7.00	14.00
Total			52.00	105.00	157.00
Segundo cuatrimestre					
Semana	Temas	Actividades de enseñanza aprendizaje	Horas de trabajo presencial	Horas de trabajo autónomo	Total
Semana 1:	Prácticas de 1 a 3	Clases de laboratorio (9)	9.00	4.00	13.00
Semana 2:	Prácticas de 4 a 8	Clases de laboratorio (15)	15.00	7.00	22.00
Semana 3:	Prácticas 9 y 10	Clases de laboratorio (6)	6.00	3.00	9.00
Semana 4:		Exposiciones orales (4)	4.00	8.00	12.00
Semana 16 a 18:	Evaluación	Evaluación y trabajo autónomo del alumno para la preparación de la evaluación.	4.00	8.00	12.00
Total			38.00	30.00	68.00