



Guía Docente				
Datos Identificativos				2015/16
Asignatura (*)	Química Médica	Código	610509015	
Titulación	Mestrado en Investigación Química e Química Industrial			
Descritores				
Ciclo	Período	Curso	Tipo	Créditos
Mestrado Oficial	1º cuatrimestre	Primeiro	Optativa	3
Idioma	CastelánInglés			
Modalidade docente	Presencial			
Prerrequisitos				
Departamento	Química Fundamental			
Coordinación		Correo electrónico		
Profesorado	Riveiros Santiago, Ricardo	Correo electrónico	ricardo.riveiros@udc.es	
Web				
Descrición xeral				

Competencias / Resultados do título	
Código	Competencias / Resultados do título
A1	Definir conceptos, principios, teorías e feitos das diferentes áreas especializadas da Química
A2	Propoñer alternativas para resolver os problemas químicos complexos das diversas especialidades químicas
A3	Aplicar os materiais e as biomoléculas en ámbitos innovadores da industria e Enxeñaría Química
A4	Innovar en métodos de síntese e análise química relacionados coas diferentes áreas da Química.
B1	Posuír e comprender coñecementos que acheguen unha base ou oportunidade de ser orixinais no desenvolvemento e/ou aplicación de ideas, a miúdo nun contexto de investigación
B2	Que os estudantes saiban aplicar os coñecementos adquiridos e a súa capacidade de resolución de problemas en contornos novos ou pouco coñecidos dentro de contextos máis amplos (ou multidisciplinares) relacionados coa súa área de estudo.
B4	Que os estudantes saiban comunicar as súas conclusións e os coñecementos e razóns últimas que as sustentan a públicos especializados e non especializados dun modo claro e sen ambigüedades.
B7	Identificar información da literatura utilizando as canles axeitadas e integrar esta información para crear e contextualizar un tema de investigación.
B10	Usar a terminoloxía científica en inglés para discutir os resultados experimentais no contexto da profesión química
B11	Aplicar correctamente as novas tecnoloxías de capturar e organizar a información para resolver problemas na actividade profesional

Resultados da aprendizaxe			
Resultados de aprendizaxe	Competencias / Resultados do título		
	Adquisición de coñecementos avanzados de química médica e as súas aplicacións máis importantes no descubrimento de fármacos.	AM1 AM2 AM3 AM4	BM1 BM2 BM4 BM7 BM10 BM11
Coñecer as etapas necesarias para o desenvolvemento dun fármaco, que van dende o descubrimento de un composto activo a nivel de laboratorio ata a súa implantación no mercado.	AM1 AM2 AM3 AM4	BM1 BM2 BM4 BM7 BM10 BM11	



Coñecer as principais dianas terapéuticas empregadas no descubrimento de fármacos.	AM1 AM2 AM3 AM4	BM1 BM2 BM4 BM7 BM10 BM11
Coñecer as ferramentas empregadas na identificación e deseño de compostos cabeza de serie.	AM1 AM2 AM3 AM4	BM1 BM2 BM4 BM7 BM10 BM11
Coñecer as bases químicas da optimización da actividade dun composto cabeza de serie.	AM1 AM2 AM3 AM4	BM1 BM2 BM4 BM7 BM10 BM11

Contidos	
Temas	Subtemas
Tema 1. Aspectos xerais, definicións e conceptos básicos	Perspectiva histórica do descubrimento de fármacos. Etapas no descubrimento dun fármaco. Catálisis enzimática. Definicións e conceptos básicos: agonismo, antagonismo, análogos do estado de transición, inhibición reversible (competitiva, non competitiva), inhibición irreversible, sustratos suicidas. Exemplos ilustrativos.
Tema 2. Dianas terapéuticas	Clasificación das dianas terapéuticas. Principais características. Enzimas. Transportadores de membrana. Canles iónicos dependentes do voltaxe. Canles de catións non selectivos. Receptores con canles iónicos intrínsecos. Receptores con actividade enzimática intrínseca. Receptores acoplados a proteínas citosólicas. Receptores acoplados a proteína G. Receptores nucleares.
Tema 3. Estratexias para o descubrimento de fármacos I. Deseño baseado na estrutura	Evolución do deseño baseado na estrutura no descubrimento de fármacos. Aspectos prácticos da determinación da estrutura tridimensional dunha diana - cristalografía de raios X para o deseño baseado na estrutura. Aplicacións da RMN para o deseño racional. Docking. Simulacións de dinámica molecular. QM/MM. Exemplos significativos.
Tema 4. Estratexias para o descubrimento de fármacos II. Cribado virtual e baseado en fragmentos.	Conceptos básicos no cribado virtual de candidatos. Bases de datos dispoñibles. Aplicacións: identificación de ligandos para unha diana ou de posibles dianas para un ligando. Principios básicos do deseño baseado en fragmentos. Selección de candidatos mediante cristalografía de raios X. Outros métodos biofísicos de selección. Exemplos ilustrativos.
Tema 5. Optimización de compostos cabeza de serie	Modificacións moleculares baseadas en reemplazamento isostérico. Restrición conformacional e impedimento estérico en química médica. Ligandos homo e heterodiméricos. Profármacos. Cuantificación da relación Estrutura-Actividade (QSAR).

Planificación				
Metodoloxías / probas	Competencias / Resultados	Horas lectivas (presenciais e virtuais)	Horas traballo autónomo	Horas totais



Sesión maxistral	A1 A2 A3 A4 B1 B2 B4 B7 B10 B11	12	29	41
Seminario	A1 A2 A3 A4 B1 B2 B4 B7 B10 B11	7	14	21
Traballos tutelados	A1 A2 A3 A4 B1 B2 B4 B7 B10 B11	2	4	6
Proba obxectiva	A1 A2 A3 A4 B1 B2 B4	3	3	6
Atención personalizada		1	0	1

**\*Os datos que aparecen na táboa de planificación son de carácter orientativo, considerando a heteroxeneidade do alumnado**

Metodoloxías	
Metodoloxías	Descrición
Sesión maxistral	Levaranse a cabo 12 sesións en clases maxistras en grupo único onde se desenvolverán os contidos teóricos da materia. Consistirá maioritariamente en presentacións de Power-Point. Os alumnos terán, con suficiente antelación, as copias das correspondentes presentacións a través da plataforma Moodle da materia, co fin de que o alumno poida preparar previamente a materia que se vai impartir, ademais de facilitar o seguimento das explicacións. Fomentarase en todo momento a participación interactiva do alumno. A asistencia a estas clases non é obrigatoria, pero é máis que recomendable.
Seminario	Proponse levar a cabo 7 sesións de seminarios de grupo reducido onde os alumnos presentarán os traballos formulados polo profesor. Haberá unha quenda de debate e preguntas sobre o tema proposto tanto por parte dos alumnos como do profesor. Os alumnos dispoñerán con suficiente antelación dos devanditos traballos a través da plataforma Moodle, para que os elaboren antes do inicio destas clases. A asistencia a estas clases é obrigatoria.
Traballos tutelados	Titorías programadas polo profesor e coordinadas polo Centro. Supoñerán para cada alumno 2 horas. Propóñense actividades como a supervisión de traballos dirixidos, aclaración de dúbidas, etc. A asistencia a estas clases é obrigatoria
Proba obxectiva	Levarase a cabo unha proba obxectiva que versará sobre a totalidade dos contidos da materia.

Atención personalizada	
Metodoloxías	Descrición
Traballos tutelados	O alumno debe repasar os conceptos teóricos introducidos nos distintos temas utilizando o manual de referencia e o material proporcionado polo profesor. Aqueles alumnos que encontren dificultades importantes á hora de traballar as actividades propostas deben de acudir nas horas de titoría do profesor, co obxectivo de que este poida analizar o problema e axudar a resolver as devanditas dificultades.
Seminario	O profesor analizará con aqueles alumnos que non superen con éxito o proceso de avaliación, e así o desexen, as dificultades encontradas na aprendizaxe dos contidos da materia. Tamén lles proporcionará material adicional (cuestións, exercicios, exames, etc.) para reforzar a aprendizaxe da materia.

Avaliación			
Metodoloxías	Competencias / Resultados	Descrición	Cualificación
Traballos tutelados	A1 A2 A3 A4 B1 B2 B4 B7 B10 B11	Terase en conta o traballo realizado durante os traballos tutelados. Valoraranse os seguintes elementos: Resolución de problemas e casos prácticos (4%), realización de traballos e informes escritos (2%), exposición oral [(traballos, informes, problemas e casos prácticos), 2%] e preguntas e cuestións orais durante o curso (1%).	10



Seminario	A1 A2 A3 A4 B1 B2 B4 B7 B10 B11	Terase en conta o traballo realizado durante os seminarios. Valoraranse os seguintes elementos: Resolución de problemas e casos prácticos (11%), realización de traballos e informes escritos (7,5%), exposición oral [(traballos, informes, problemas e casos prácticos), 7,5%] e preguntas e cuestións orais durante o curso (4%).	30
Proba obxectiva	A1 A2 A3 A4 B1 B2 B4	A proba obxectiva constará de cuestións teóricas, prácticas e/ou teórico prácticas, sobre a totalidade dos contidos do curso.	60

### Observacións avaliación

A presentación ao exame final está condicionada á participación en polo menos o 80% das actividades docentes presenciais de asistencia obrigatoria (seminarios e traballos tutelados).

Os alumnos repetidores terán o mesmo réxime de asistencia ás clases que os que cursan a materia por primeira vez.

### Fontes de información

<b>Bibliografía básica</b>	<ul style="list-style-type: none"><li>- Camille Georges Wermuth (2008). The practice of medicinal chemistry, 3rd Ed. Amsterdam: Elsevier</li><li>- Graham L. Patrick (2013). An introduction to medicinal chemistry, 5th Ed. Oxford: Oxford University Press</li><li>- Donald J. Abraham &amp; David P. Rotella, Eds. (2010). Burger's medicinal chemistry, drug discovery and development, 7th Ed. Wiley</li></ul>
<b>Bibliografía complementaria</b>	<ul style="list-style-type: none"><li>- E. J. Corey, B. Czako, L. Kürti (2007). Molecules and medicine. New Jersey: John Wiley and Sons</li><li>- K. C. Nicolaou, T. Montagnon, Eds. (2008). Molecules that changed the world. Weinheim: Wiley-VCH</li><li>- Edward R. Zartler &amp; Michael J. Shapiro, Eds. (2008). Fragment-based drug discovery, a practical approach. Chichester: John Wiley &amp; Sons</li><li>- Roderick, E. Hubbard Ed (2006). Structure-based drug discovery, an overview. Cambridge: RSC-Publishing</li><li>- Robert A. Copeland (2005). Evaluation of enzyme inhibitors in drug discovery. New Jersey: Wiley-Interscience</li><li>- Celerino Abad-Zapatero (2013). Ligand efficiency indices for drug discovery. Amsterdam: Elsevier</li></ul>

### Recomendacións

#### Materias que se recomenda ter cursado previamente

Química de Biomoléculas/610509014

#### Materias que se recomenda cursar simultaneamente

#### Materias que continúan o temario

### Observacións

Recoméndase ter coñecementos básicos na visualización da estrutura tridimensional das biomoléculas mediante programas de visualización tales como Pymol, Mercury, etc. Recomendase o manexo de bases de datos tales como Protein Data Bank (pdb), ExPasy, etc.

(\*A Guía docente é o documento onde se visualiza a proposta académica da UDC. Este documento é público e non se pode modificar, salvo casos excepcionais baixo a revisión do órgano competente dacordo coa normativa vixente que establece o proceso de elaboración de guías