



| Guía Docente | | | | |
|-----------------------|--|--------------------|-------------------------|----------|
| Datos Identificativos | | | | 2016/17 |
| Asignatura (*) | Química Médica | Código | 610509015 | |
| Titulación | Mestrado en Investigación Química e Química Industrial (plan 2016) | | | |
| Descritores | | | | |
| Ciclo | Período | Curso | Tipo | Créditos |
| Mestrado Oficial | Anual | Primeiro | Optativa | 3 |
| Idioma | CastelánInglés | | | |
| Modalidade docente | Presencial | | | |
| Prerrequisitos | | | | |
| Departamento | Química Fundamental | | | |
| Coordinación | Riveiros Santiago, Ricardo | Correo electrónico | ricardo.riveiros@udc.es | |
| Profesorado | Riveiros Santiago, Ricardo | Correo electrónico | ricardo.riveiros@udc.es | |
| Web | | | | |
| Descrición xeral | | | | |

| Competencias do título | |
|------------------------|--|
| Código | Competencias 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 do título | |
| Adquisición de coñecementos avanzados de química médica e as súas aplicacións máis importantes no descubrimento de fármacos. | AM1 | BM1 | |
| | AM2 | BM2 | |
| | AM3 | BM4 | |
| | AM4 | 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 | BM1 | |
| | AM2 | BM2 | |
| | AM3 | BM4 | |
| | AM4 | 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 | Horas presenciais | Horas non presenciais / 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 | 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

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

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. Recoméndase o manexo de bases de datos tales como Protein Data Bank (pdb), Expaty, 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