UNIVERSIDADE DA CORUÑA

Guia docente				
Datos Identificativos				2016/17
Asignatura (*)	Química Médica		Código	610509015
Titulación	Mestrado en Investigación Química e Química Industrial (plan 2016)			
Descriptores				
Ciclo	Periodo	Curso	Tipo	Créditos
Máster Oficial	Anual	Primero	Optativa	3
Idioma	CastellanoInglés			
Modalidad docente	Presencial			
Prerrequisitos				
Departamento	Química Fundamental			
Coordinador/a	Riveiros Santiago, Ricardo	Correo electrónico	ricardo.riveiros@udc.es	
Profesorado	Riveiros Santiago, Ricardo	Correo electrónico	ricardo.riveiros@udc.es	
Web				
Descripción general	En esta materia se pretende que el alumno adquiera los conceptos fundamentales en el ámbito de la química médica y el diseño de fármacos, así como de que conozca las etapas necesarias para el desarrollo de un fármaco, que van desde el descubrimiento de un compuesto activo a nivel de laboratorio a su implantación en el mercado. La materia abordará además las principales metodologías actuales en la búsqueda de candidatos cabeza de serie que se utilizan tanto a nivel industrial como académico, así como su optimización para el desarrollo de un fármaco. Esto incluye desde el diseño racional basado en la estructura tridimensional de la diana, el cribado virtual de compuestos, al diseño basado en fragmentos. Se describirá además los aspectos más relevantes en la cuantificación de las relaciones estructura-actividad (QSAR). Cada uno de los contenidos de esta materia se ilustrará con ejemplos representativos.			

Competencias / Resultados del título	
Código	Competencias / Resultados del título
A1	Definir conceptos, principios, teorías y hechos especializados de las diferentes áreas de la Química
A2	Proponer alternativas para la resolución de problemas químicos complejos de las diferentes especialidades químicas
A3	Aplicar los materiales y las biomoléculas en campos innovadores de la industria e ingeniería química
A4	Innovar en los métodos de síntesis y análisis químico relacionados con las diferentes áreas de la Química.
B1	Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación
B2	Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.
B4	Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.
B7	Identificar información de la bibliografía utilizando los canales apropiados e integrar dicha información para plantear y contextualizar un tema de investigación.
B10	Utilizar terminología científica en lengua inglesa para argumentar los resultados experimentales en el contexto de la profesión química
B11	Aplicar correctamente las nuevas tecnologías de captación y organización de información para solucionar problemas en la actividad profesional

Resultados de aprendizaje			
Resultados de aprendizaje	Competencias / Resultados del título		
Adquisición de conocimientos avanzados sobre Química Médica y sus aplicaciones más importantes en el descubrimiento de fármacos.	AM1 AM2 AM3 AM4	BM1 BM2 BM4 BM7 BM10 BM11	

Conocer las etapas necesarias para el desarrollo de un fármaco, que van desde el descubrimiento de un compuesto activo a nivel de laboratorio a su implantación en el mercado.	AM1 AM2 AM3 AM4	BM1 BM2 BM4 BM7 BM10 BM11	
Conocer las principales dianas terapéuticas utilizadas en el descubrimiento de fármacos.	AM1 AM2 AM3 AM4	BM1 BM2 BM4 BM7 BM10 BM11	
Conocer las herramientas utilizadas en la identificación y diseño de compuestos cabeza de serie.	AM1 AM2 AM3 AM4	BM1 BM2 BM4 BM7 BM10 BM11	
Conocer las bases químicas de la optimización de la actividad de un compuesto cabeza de serie.	AM1 AM2 AM3 AM4	BM1 BM2 BM4 BM7 BM10 BM11	

Contenidos	
Tema	**Subtema**
Tema 1. Aspectos generales, definiciones y conceptos básicos	Perspectiva histórica del descubrimiento de fármacos. Etapas en el descubrimiento de un fármaco. Catálisis enzimática. Definiciones y conceptos básicos: agonismo, antagonismo, análogos del estado de transición, inhibición reversible (competitiva, no competitiva), inhibición irreversible, sustratos suicidas. Ejemplos ilustrativos.
Tema 2. Dianas terapéuticas	Clasificación de las dianas terapéuticas. Principales características. Enzimas. Transportadores de membrana. Canales iónicos dependientes del voltaje. Canales de cationes no selectivos. Receptores con canales iónicos intrínsecos. Receptores con actividad enzimática intrínseca. Receptores acoplados a proteínas citosólicas. Receptores acoplados a proteína G. Receptores nucleares.
Tema 3. Estrategias para el descubrimiento de fármacos I. Diseño basado en la estructura	Evolución del diseño basado en la estructura en el descubrimiento de fármacos. Aspectos prácticos de la determinación de la estructura tridimensional de una diana - cristalografía de rayos X para el diseño basado en la estructura. Aplicaciones de la RMN para el diseño racional. Docking. Simulaciones de dinámica molecular. QM/MM. Ejemplos significativos.
Tema 4. Estrategias para el descubrimiento de fármacos II. Cribado virtual y basado en fragmentos	Conceptos básicos en el cribado virtual de candidatos. Bases de datos disponibles. Aplicaciones: identificación de ligandos para una diana o de posibles dianas de un ligando. Principios básicos del diseño basado en fragmentos. Selección de candidatos mediante cristalografía de rayos-X. Otros métodos biofísicos de selección. Ejemplos ilustrativos.

Tema 5. Optimización de compuestos cabeza de serie	Modificaciones moleculares basadas en reemplazamiento isostérico. Restricción conformacional e impedimento estérico en química médica. Ligandos homo y heterodiméricos. Profármacos. Cuantificación de la relación Estructura-Actividad (QSAR).

Planificación				
Metodologías / pruebas	Competencias / Resultados	Horas lectivas (presenciales y virtuales)	Horas trabajo autónomo	Horas totales
Sesión magistral	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
Trabajos tutelados	A1 A2 A3 A4 B1 B2 B4 B7 B10 B11	2	4	6
Prueba objetiva	A1 A2 A3 A4 B1 B2 B4	3	3	6
Atención personalizada		1	0	1
(*)Los datos que aparecen en la tabla de planificación són de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de los alumnos				

Metodologías	
Metodologías	Descripción
Sesión magistral	Se llevarán a cabo 12 sesiones de clases magistrales en grupo único donde se desarrollarán los contenidos teóricos de la materia acompañados de los correspondientes ejemplos ilustrativos. Consistirá mayoritariamente en presentaciones de Power-Point. Los alumnos tendrán, con suficiente antelación, las copias de las correspondientes presentaciones a través del aula virtual de la materia, con el fin de que el alumno pueda preparar previamente la materia que se va a impartir, además de facilitar el seguimiento de las explicaciones. Se fomentará en todo momento la participación interactiva del alumno. La asistencia a estas clases no es obligatoria, pero es más que recomendable.
Seminario	Se propone llevar a cabo 7 sesiones de seminarios de grupo reducido donde los alumnos presentarán los trabajos planteados por el profesor. Habrá un turno de debate y preguntas sobre el tema propuesto tanto por parte de los alumnos como del profesor. Los alumnos dispondrán con suficiente antelación de dichos trabajos a través de la plataforma Moodle, para que los elaboren antes del inicio de estas clases. La asistencia a estas clases es obligatoria.
Trabajos tutelados	Tutorías programadas por el profesor y coordinadas por el Centro. Supondrán para cada alumno 2 horas. Se proponen actividades como la supervisión de trabajos dirigidos, aclaración de dudas, etc. La asistencia a estas clases es obligatoria.
Prueba objetiva	Se llevará a cabo una prueba objetiva que versará sobre la totalidad de los contenidos de la asignatura.

Atención personalizada	
Metodologías	Descripción
Trabajos tutelados Seminario	El alumno debe repasar los conceptos teóricos introducidos en los distintos temas utilizando el manual de referencia y el material proporcionado por el profesor. Aquellos alumnos que encuentren dificultades importantes a la hora de trabajar las actividades propuestas deben de acudir en las horas de tutoría del profesor, con el objetivo de que éste pueda analizar el problema y ayudar a resolver dichas dificultades. El profesor analizará con aquellos alumnos que no superen con éxito el proceso de evaluación, y así lo deseen, las dificultades encontradas en el aprendizaje de los contenidos de la asignatura. También les proporcionará material adicional (cuestiones, ejercicios, exámenes, etc.) para reforzar el aprendizaje de la materia.

Evaluación

Metodologías	Competencias / Resultados	Descripción	Calificación
Trabajos tutelados	A1 A2 A3 A4 B1 B2 B4 B7 B10 B11	Se tendrá en cuenta el trabajo realizado durante los trabajos tutelados. Se valorarán los siguientes elementos: Resolución de problemas y casos prácticos (4%), realización de trabajos e informes escritos (2%), exposición oral [(trabajos, informes, problemas y casos prácticos), 2%] y preguntas y cuestiones orales durante el curso (1%)	10
Seminario	A1 A2 A3 A4 B1 B2 B4 B7 B10 B11	Se tendrá en cuenta el trabajo realizado durante los seminarios. Se valorarán los siguientes elementos: Resolución de problemas y casos prácticos (11%), realización de trabajos e informes escritos (7,5%), exposición oral [(trabajos, informes, problemas y casos prácticos), 7,5%] y preguntas y cuestiones orales durante el curso (4%)	30
Prueba objetiva	A1 A2 A3 A4 B1 B2 B4	La prueba objetiva constará de cuestiones teóricas, prácticas y/o teórico prácticas, sobre la totalidad de los contenidos del curso.	60

Observaciones evaluación
La presentación al examen final está condicionada a la participación en al menos el 80% de las actividades docentes presenciales de asistencia obligatoria (seminarios y trabajos tutelados). Los alumnos repetidores tendrán el mismo régimen de asistencia a las clases que los que cursan la asignatura por primera vez.

Fuentes de información	
Básica	- 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
Complementária	- E. J. Corey, B, Czakó, 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

Recomendaciones
Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente
Química de Biomoléculas/610509014
Asignaturas que se recomienda cursar simultáneamente
Asignaturas que continúan el temario
Otros comentarios
Se recomienda tener conocimientos básicos en la visualización de la estructura tridimensional de las biomoléculas mediante programas de visualización tales como Pymol, Mercury, etc. Se recomienda el manejo de bases de datos tales como Protein Data Bank (pdb), Expasy, etc.

(*) La Guía Docente es el documento donde se visualiza la propuesta académica de la UDC. Este documento es público y no se puede modificar, salvo cosas excepcionales bajo la revisión del órgano competente de acuerdo a la normativa vigente que establece el proceso de elaboración de guías