



Guía docente				
Datos Identificativos				2017/18
Asignatura (*)	Química Médica	Código	610509116	
Titulación	Mestrado Universitario en Investigación Química e Química Industrial (Plan 2017)			
Descriptorios				
Ciclo	Periodo	Curso	Tipo	Créditos
Máster Oficial	Anual	Primero	Optativa	3
Idioma	CastellanoInglés			
Modalidad docente	Presencial			
Prerrequisitos				
Departamento	Química			
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 del título	
Código	Competencias del título
A1	CE1 - Definir conceptos, principios, teorías y hechos especializados de las diferentes áreas de la Química
A2	CE2 -Proponer alternativas para la resolución de problemas químicos complejos de las diferentes especialidades químicas
A3	CE4 - Innovar en los métodos de síntesis y análisis químico relacionados con las diferentes áreas de la Química.
A4	CE3 - Aplicar los materiales y las biomoléculas en campos innovadores de la industria e ingeniería química
B1	CB6 - 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	CB7 - 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	CB9 - 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	CG2 - Identificar información de la literatura científica utilizando los canales apropiados e integrar dicha información para plantear y contextualizar un tema de investigación
B10	CG5 - Utilizar terminología científica en lengua inglesa para argumentar los resultados experimentales en el contexto de la profesión química
B11	CG6 - 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 del título



Conocer los conceptos fundamentales en química médica y el diseño de fármacos: dianas terapéuticas, inhibidores enzimáticos, agonistas, antagonistas, propiedades farmacológicas óptimas, etc.	AM1 AM2 AM3 AM4	BM1 BM2 BM4 BM7 BM10 BM11
Conocer las etapas en el desarrollo de un fármaco, 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 metodologías en la búsqueda de candidatos cabeza de serie y su optimización para el desarrollo de un fármaco. Desde el diseño racional basado en la estructura tridimensional de la diana, el cribado real o virtual de compuestos al diseño basado en fragmentos, etc.	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). Ejemplos ilustrativos.

Planificación				
Metodologías / pruebas	Competencias / Resultados	Horas lectivas (presenciales y virtuales)	Horas trabajo autónomo	Horas totales



Sesión magistral	A1 A2 A4 A3 B1 B2 B4 B7 B10 B11	12	29	41
Seminario	A1 A2 A4 A3 B1 B2 B4 B7 B10 B11	7	18	25
Prueba objetiva	A1 A4 A3 B10 B1	2	5	7
Atención personalizada		2	0	2

(\*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 por videoconferencia 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 de la plataforma Moodle 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 llevarán a cabo 7 sesiones de seminarios de grupo reducido donde los alumnos resolverán ejercicios prácticos propuestos por el profesor (problemas, interpretación y procesamiento de la información empleando programas informáticos especializados e internet, evaluación de publicaciones científicas, etc) y elaborarán trabajos e informes relacionados con las distintas materias del máster y los expondrán públicamente, debatiendo con el profesor y el resto de alumnos. Los alumnos dispondrán con suficiente antelación antes del inicio de estas clases de la información necesaria a través de la plataforma Moodle. 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
Seminario	<p>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 acudir en las horas de tutoría del profesor, con el objetivo de que éste pueda analizar el problema y ayudar a resolver dichas dificultades.</p> <p>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.</p> <p>Los alumnos con reconocimiento de dedicación a tiempo parcial y dispensa académica de exención de asistencia, podrán realizar los seminarios en tutorías personalizadas y/o grupales en horario a convenir con los profesores. Las actividades a realizar en estas tutorías serán similares a las de los alumnos en régimen ordinario y computarán para la evaluación.</p>

Evaluación			
Metodologías	Competencias / Resultados	Descripción	Calificación



Seminario	A1 A2 A4 A3 B1 B2 B4 B7 B10 B11	La evaluación continua tendrá un peso del 40% en la calificación de la asignatura y constará de dos componentes: clases interactivas en grupo reducido (seminarios) y clases interactivas en grupo muy reducido (tutorías). Los seminarios y las tutorías incluirán los elementos siguientes: resolución de problemas y casos prácticos (10%), realización de trabajos e informes escritos (10%), exposición oral [(trabajos, informes, problemas y casos prácticos), 10%], y evaluación mediante preguntas y cuestiones orales durante el curso (10%).	40
Prueba objetiva	A1 A4 A3 B10 B1	La prueba objetiva versará sobre la totalidad de los contenidos de la asignatura.	60

### Observaciones evaluación

La calificación del alumno se obtendrá como resultado de aplicar la fórmula siguiente:

$$\text{Nota final} = 0.4 \times N1 + 0.6 \times N2$$

Siendo N1 la nota numérica correspondiente a la evaluación continua (escala 0-10) y N2 la nota numérica de la prueba objetiva (escala 0-10).

La presentación a la prueba objetiva 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.

En el caso de alumnos con reconocimiento de dedicación a tiempo parcial y dispensa académica de exención de asistencia la calificación de la evaluación continua se sustituirá por la obtenida en las tutorías personalizadas.

Obtendrán la calificación de "no presentado", los alumnos que participen en menos de un 25% de las actividades académicas programadas y no se presenten a la prueba objetiva.

### Fuentes de información

<b>Básica</b>	- 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
<b>Complementaria</b>	- 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 - Celerino Abad Zapatero (2013). Ligand efficiency indices for drug discovery. Amsterdam: Elsevier

### Recomendaciones

#### Asignaturas que se recomienda haber cursado previamente

/

#### 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