



Guía Docente				
Datos Identificativos			2017/18	
Asignatura (*)	Química Médica	Código	610509116	
Titulación	Mestrado Universitario en Investigación Química e Química Industrial (Plan 2017)			
Descritores				
Ciclo	Período	Curso	Tipo	Créditos
Mestrado Oficial	Anual	Primeiro	Optativa	3
Idioma	CastelánInglés			
Modalidade docente	Presencial			
Prerrequisitos				
Departamento	Química			
Coordinación	Riveiros Santiago, Ricardo	Correo electrónico	ricardo.riveiros@udc.es	
Profesorado	Riveiros Santiago, Ricardo	Correo electrónico	ricardo.riveiros@udc.es	
Web				
Descrición xeral	Nesta materia preténdese que o alumno adquira os conceptos fundamentais no ámbito da química médica e o deseño de fármacos, así como de que coñeza as etapas necesarias para o desenvolvemento dun fármaco, que van desde o descubrimento dun composto activo a nivel de laboratorio ata a súa implantación no mercado. A materia abordará ademais as principais metodoloxías actuais na procura de candidatos cabeza de serie que se utilizan tanto a nivel industrial como académico, así como a súa optimización para o desenvolvemento dun fármaco. Isto inclúe desde o deseño racional baseado na estrutura tridimensional da diana, o cribado virtual de compostos, ao deseño baseado en fragmentos. Describíranse ademais os aspectos máis relevantes na cuantificación da relación estrutura-actividade (QSAR). Cada un dos contidos desta materia ilustrárase con exemplos representativos.			

Competencias / Resultados do título	
Código	Competencias / Resultados do título
A1	CE1 - Definir conceptos, principios, teorías e feitos das diferentes áreas especializadas da Química
A2	CE2 - Propoñer alternativas para resolver os problemas químicos complexos das diversas especialidades químicas
A3	CE4 - Innovar en métodos de síntese e análise química relacionados coas diferentes áreas da Química.
A4	CE3 - Aplicar os materiais e as biomoléculas en ámbitos innovadores da industria e Enxeñaría Química
B1	CB6 ? 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	CB7 - 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	CB9 - 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	CG2 - Identificar información da literatura utilizando as canles axeitadas e integrar esta información para crear e contextualizar un tema de investigación.
B10	CG5 - Usar a terminoloxía científica en inglés para discutir os resultados experimentais no contexto da profesión química
B11	CG6 - 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	
Coñecer os conceptos fundamentais en química médica e o deseño de fármacos: dianas terapéuticas, inhibidores enzimáticos, agonistas, antagonistas, propiedades farmacolóxicas óptimas, etc.	AM1	BM1
	AM2	BM2
	AM3	BM4
	AM4	BM7
		BM10
		BM11



Coñecer as etapas no desenvolvemento dun fármaco, 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 metodoloxías na búsqueda de candidatos cabeza de serie para o desenvolvemento dun fármaco. Dende o deseño racional baseado na estrutura tridimensional da diana, o cribado real ou virtual de compostos, ao deseño baseado en fragmentos, etc.	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). Exemplos ilustrativos.

Planificación				
Metodoloxías / probas	Competencias / Resultados	Horas lectivas (presenciais e virtuais)	Horas traballo autónomo	Horas totais
Sesión maxistral	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
Proba obxectiva	A1 A4 A3 B10 B1	2	5	7
Atención personalizada		2	0	2



*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 maxistrais por videoconferencia 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. Fomentárase en todo momento a participación interactiva do alumno. A asistencia a estas clases non é obrigatoria, pero é máis que recomendable.
Seminario	Levaranse a cabo 7 sesións de seminarios de grupo reducido onde os alumnos resolverán exercicios prácticos propostos polo profesor (problemas, interpretación e procesamento da información empregando programas informáticos especializados e internet, avaliación de publicacións científicas, etc), e levarán a cabo traballos e informes relacionados coas distintas materias do mestrado e os exporán publicamente, debatendo co profesor e o resto de alumnos. Os alumnos disporán con suficiente antelación antes del inicio de estas clases da información necesaria a través da plataforma Moodle. 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
Seminario	<p>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.</p> <p>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.</p> <p>Os alumnos con reconecimiento de dedicación a tempo parcial e dispensa académica de exención de asistencia, poderán realizar os seminarios en titorías personalizadas e/ou grupales en horario a convir cos profesores. As actividades para realizar nestas titorías serán similares ás dos alumnos en réxime ordinario e computarán para a avaliación final.</p>

Avaliación			
Metodoloxías	Competencias / Resultados	Descrición	Cualificación
Seminario	A1 A2 A4 A3 B1 B2 B4 B7 B10 B11	A avaliación continua terá un peso do 40% na cualificación da asignatura e constará de dúas compoñentes: clases interactivas en grupo reducido (seminarios) e clases interactivas en grupo moi reducido (titorías). Os seminarios e as titorías incluírán os elementos seguintes: resolución de problemas e casos prácticos (10%), realización de traballos e informes escritos (10%), exposición oral [(traballos, informes, problemas e casos prácticos), 10%] e avaliación mediante preguntas e cuestións orais durante o curso (10%).	40
Proba obxectiva	A1 A4 A3 B10 B1	A proba obxectiva versará sobre a totalidade dos contidos da asignatura.	60

Observacións avaliación



A cualificación do alumno obterase como resultado de aplicar a seguinte fórmula:

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

Sendo N1 a nota numérica correspondente á avaliación continua (escala 0-10) e N2 a nota numérica da proba obxectiva(escala 0-10).

A presentación a proba obxectiva 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.

No caso de alumnos con recoñecemento de dedicación a tempo parcial e dispensa académica de exención de asistencia, a cualificación da avaliación continua se substituirá pola obtida nas titorías personalizadas.

Outorgarase a cualificación de "non presentado" aos alumnos que participen en menos dun 25% das actividades académicas programadas e non se presenten á proba obxectiva.

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
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- Celerino Abad Zapatero (2013). Ligand efficiency indices for drug discovery. Amsterdam: Elsevier

Recomendacións

Materias que se recomenda ter cursado previamente

/

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