



Guía Docente			
Datos Identificativos			2024/25
Asignatura (*)	Química Médica	Código	610509116
Titulación			
Descriptores			
Ciclo	Período	Curso	Tipo
Mestrado Oficial	2º cuatrimestre	Primeiro	Optativa
Idioma	CastelánInglés		
Modalidade docente	Presencial		
Prerrequisitos			
Departamento	Departamento profesorado másterQuímica		
Coordinación		Correo electrónico	
Profesorado	Riveiros Santiago, Ricardo	Correo electrónico	ricardo.riveiros@udc.es
Web	https://www.usc.gal/es/estudios/masteres/ciencias/master-universitario-investigacion-quimica-quimica-industrial		
Descripción xeral	<p>A guía docente orixinal de esta asignatura está disponible na web do máster:</p> <p>https://www.usc.gal/es/estudios/masteres/ciencias/master-universitario-investigacion-quimica-quimica-industrial</p> <p>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 ademáis as principais metodoloxías actuáis 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. Describiranse ademáis os aspectos más relevantes na cuantificación da relación estrutura-actividade (QSAR). Cada un dos contidos desta materia ilustrarase con exemplos representativos.</p>		

Competencias / Resultados do título	
Código	Competencias / Resultados do título

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 CM1
		AM2	BM2 CM3
		AM3	BM4 CM4
		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	BM1 CM1
		AM2	BM2 CM3
		AM3	BM4 CM4
		AM4	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 estructura tridimensional da diana, o cribado real ou virtual de compostos, ao deseño baseado en fragmentos, etc.		AM1	BM1 CM1
		AM2	BM2 CM3
		AM3	BM4 CM4
		AM4	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 actividad 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 estructura	Evolución do deseño baseado na estructura no descubrimento de fármacos. Aspectos prácticos da determinación da estructura tridimensional dunha diana - cristalografía de raios X para o deseño baseado na estructura. 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 disponíveis. 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 Estructura-Actividade (QSAR).

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	24	36
Seminario	A1 A2 A4 A3 B1 B2 B4 B7 B10 B11 C1 C3 C4	7	18	25
Traballos tutelados	B1 B2 B4 B7	2	4	6
Proba obxectiva	A1 A4 A3 B1 B10	2	4	6
Atención personalizada		2	0	2

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

Metodoloxías	
Metodoloxías	Descripción
Sesión maxistral	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. Fomentarase en todo momento a participación interactiva do alumno. A asistencia a estas clases non é obligatoria, pero é máis que recomendable.



Seminario	Sesiós 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 obligatoria.
Traballos tutelados	Se levarán a cabo titorías programadas polo profesor e coordinadas polo centro. Se proponen actividades tales como a supervisión de traballos dirixidos, clarificación de dúbihdas, etc. A asistencia a estas clases é obligatoria.
Proba obxectiva	Levarase a cabo unha proba obxectiva que versará sobre a totalidade dos contidos da materia.

Atención personalizada

Metodoloxías	Descripción
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 (questiós, exercicios, exames, etc.) para reforzar a aprendizaxe da materia.</p> <p>Os alumnos con reconocimiento 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	Descripción	Cualificación
Seminario	A1 A2 A4 A3 B1 B2 B4 B7 B10 B11 C1 C3 C4	A avaliación continua (N1) 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 incluirán 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 cuestiós orais durante o curso (10%) ben de forma presencial ou a través de medios telemáticos.	40
Proba obxectiva	A1 A4 A3 B1 B10	A proba obxectiva ou exame final (N2) versará sobre a totalidade dos contidos da asignatura e será presencial.	60

Observacións avaliación



A avaliación de esta materia farase mediante avaliación continua (N1) e a realización dun exame final ou proba obxectiva (N2), estando condicionado o acceso ao exame a participación en a lo menos un 80% das actividades docentes de asistencia obligatoria (seminarios e tutorías ou traballos tutelados). 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 evaluación continua (escala 0-10) e N2 a nota numérica da proba obxectiva(escala 0-10).

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 sustituirá pola obtida nas tutorías 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.

A realización fraudulenta das pruebas ou actividades de avaliación, una vez comprobada, implicará directamente a calificación de suspenso (0) na materia na oportunidad correspondiente. Será de aplicación lo recogido en la "Normativa de evaluación del rendimiento académico de los estudiantes y de revisión de las calificaciones".

Fontes de información

Bibliografía básica	<ul style="list-style-type: none">- Camille Georges Wermuth (2008). The practice of medicinal chemistry, 3rd Ed. Amsterdam: Elsevier- Camille Georges Wermuth (2014). The practice of medicinal chemistry, 4th Ed. Amsterdam: Elsevier- Graham L. Patrick (2023). An introduction to medicinal chemistry, 7th Ed. Oxford: Oxford University Press <p>O libro "The practice of medicinal chemistry" 4th Ed. de Camille G. Wermuth está dispoñible on line na web da biblioteca da facultade. Está disponible na biblioteca a 5th Edicion do libro An introduction to medicinal chemistry de Graham L. Patrick con a sinatura QO-418</p>
Bibliografía complementaria	<ul style="list-style-type: none">- 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- Celino Abad Zapatero (2013). Ligand efficiency indices for drug discovery. Amsterdam: Elsevier

Recomendacións

Materias que se recomenda ter cursado previamente

/

Materias que se recomienda cursar simultaneamente

Materias que continúan o temario

Observacións

É moi importante asistir ás clases expositivas. É fundamental manter actualizado o estudo da materia. Despois de ler un tema no manual de referencia, é útil resumir os puntos importantes (ver resumo de conceptos importantes no manual de referencia). Recoméndase a lectura da bibliografía específica de cada un dos temas que axude a unha mellor comprensión dos conceptos clave. Esta guía docente é transcripción da orixinal que está disponible na web do máster:<https://www.usc.gal/es/estudios/masteres/ciencias/master-universitario-investigacion-quimica-quimica-industrial>

(*)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