

**FICHA IDENTIFICATIVA****Datos de la Asignatura**

|                        |                |
|------------------------|----------------|
| <b>Código</b>          | 44710          |
| <b>Nombre</b>          | Química médica |
| <b>Ciclo</b>           | Máster         |
| <b>Créditos ECTS</b>   | 4.0            |
| <b>Curso académico</b> | 2021 - 2022    |

**Titulación(es)**

| <b>Titulación</b>               | <b>Centro</b>       | <b>Curso</b> | <b>Periodo</b> |
|---------------------------------|---------------------|--------------|----------------|
| 2226 - M.U. en Química Orgánica | Facultad de Química | 1            | Anual          |

**Materias**

| <b>Titulación</b>               | <b>Materia</b>     | <b>Caracter</b> |
|---------------------------------|--------------------|-----------------|
| 2226 - M.U. en Química Orgánica | 6 - Química médica | Obligatoria     |

**Coordinación**

| <b>Nombre</b>           | <b>Departamento</b>    |
|-------------------------|------------------------|
| DEL POZO LOSADA, CARLOS | 325 - Química Orgánica |

**RESUMEN**

Tanto la química médica como química biológica la representan dos de las áreas de trabajo más recientes y dinámicas de la química orgánica aplicada al área de la biomedicina, a la comprensión de los sistemas biológicos y al desarrollo de nuevas estrategias terapéuticas.

La obtención de nuevos fármacos, objetivo final de la química médica, se complementa en la actualidad con la identificación de nuevas dianas terapéuticas y elucidación de los mecanismos de acción de las moléculas con actividades farmacológicas de interés, estas contribuciones se podrían encuadrar dentro del área de la química biológica.

Por tanto, esta asignatura trata de ofrecer los aspectos más novedosos y relevantes en que se trabaja en la actualidad con el fin de procurar una formación desde un punto de vista multidisciplinar en una asignatura en la que se aúnan conceptos de química orgánica, bioquímica y química computacional.



En este módulo se pretende proporcionar al alumno una visión general acerca de las tecnologías y estrategias más novedosas en que la química se aplica para obtener información y modificar sistemas biológicos. Asimismo, se pretende suministrar las bases generales de las nuevas técnicas y herramientas metodológicas para el diseño racional de fármacos.

## CONOCIMIENTOS PREVIOS

### Relación con otras asignaturas de la misma titulación

No se han especificado restricciones de matrícula con otras asignaturas del plan de estudios.

### Otros tipos de requisitos

Se requieren conocimientos sólidos de Química Orgánica.

## COMPETENCIAS

### 2226 - M.U. en Química Orgánica

- Que los/las 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.
- Que los/las estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios.
- Que los/las 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.
- Que los/las estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo
- 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.
- Utilizar las distintas técnicas de exposición -oral, escrita, presentaciones, paneles, etc- para comunicar sus conocimientos, propuestas y posiciones.
- Ser capaces de acceder a herramientas de información en otras áreas del conocimiento y utilizarlas apropiadamente.
- Saber participar en debates y discusiones, dirigirlos y coordinarlos y ser capaces de resumirlos y extraer de ellos las conclusiones más relevantes y aceptadas por la mayoría.



- Competencias de gestión tales como la capacidad para la planificación y gestión de tiempo y recursos, así como para dirigir y tomar decisiones.
- Ser capaces de valorar la necesidad de completar su formación científica, en lenguas, en informática, asistiendo a conferencias o cursos y/o realizando actividades complementarias, autoevaluando la aportación que la realización de estas actividades supone para su formación integral.
- Comprensión de la relación entre la estructura de los fármacos y su actividad.
- Conocer las principales herramientas metodológicas que se aplican en el área de la química biológica y de la química médica y saber cuál es su utilidad, aplicaciones y limitaciones.

## RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Los resultados a conseguir son el conocimiento químico de los fármacos con el fin de comprender la relación existente entre estructura química, propiedades fisicoquímicas, reactividad y respuesta biológica. Comprensión de las bases para el diseño y desarrollo de fármacos utilizando diferentes herramientas, entre ellas las de bioinformática

## DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

### 1. Química Médica e I+D+i farmacéutico

Desarrollo de los conceptos básicos en química médica y química biológica. Dianas terapéuticas: definición, clasificación y validación. Identificación y optimización de cabezas de serie. Propiedades ADME. Ensayos preclínicos: seguridad y eficacia. Diferentes modelos animales transgénicos y esporádicos. Ensayos clínicos: clasificación y finalidad. Etapas en el desarrollo de un fármaco. Coste del proceso. Puntos clave y riesgos en el desarrollo

### 2. Bases moleculares de la acción de fármacos

Clasificación de fármacos. Mecanismo de acción de fármacos. Propiedades farmacocinéticas. Propiedades farmacodinámicas

### 3. Descubrimiento, diseño y desarrollo de nuevos fármacos

Los productos naturales en química médica. Serendipia y potenciación de actividades inesperadas. Quimiotecas y HTS. Aproximaciones racionales. Vacunas



#### 4. Avances en neurofármacos

Aplicación de las estrategias en química médica y biológica al descubrimiento y desarrollo de neurofármacos. Definición de neurofarmacos. Enfermedades neurodegenerativas. Enfermedad de Alzheimer (Caso práctico: tideglusib. Caso práctico: NP-61). Enfermedad de Parkinson (Caso práctico: S14). Esclerosis lateral amiotrofica (Caso práctico: inhibidores de quinasas). Esclerosis múltiple (Caso práctico: TC3.6).

#### 5. De la estructura a la función

Introducción a la estructura 3D de macromoléculas. Interacciones macromoleculares. Relación estructura actividad. Bases de datos. Prácticas y Talleres: Construcción de la estructura 3D de ligandos. Estudio de sus propiedades fisicoquímicas, predicción propiedades druglike y visualización y manipulación de complejos fármaco-receptor. Base de datos PDB. Analisis de interacciones ligando-receptor.

#### 6. Diseño de fármacos asistido por ordenador

Modelado de proteínas. Métodos de acoplamiento automatizado. Docking. Screening virtual. Diseño de novo. Definición de farmacóforo. Búsqueda de farmacóforo. Relación Estructura Actividad Cuantitativa (QSAR) y QSAR3D.

Prácticas y talleres: Modelado por homología. Obtención de un modelo. Estudio del modo de unión de diversos ligandos por técnicas de Docking.

### VOLUMEN DE TRABAJO

| ACTIVIDAD        | Horas        | % Presencial |
|------------------|--------------|--------------|
| Clases de teoría | 20,00        | 100          |
| Seminarios       | 20,00        | 100          |
| <b>TOTAL</b>     | <b>40,00</b> |              |

### METODOLOGÍA DOCENTE

La asignatura está planteada para que el estudiante sea el protagonista de su propio aprendizaje. Desde el principio de curso los estudiantes dispondrán de todo el material didáctico necesario y la docencia se estructurará de la siguiente manera:

- Clases magistrales (presenciales).- En estas clases se introducirán los conceptos básicos de la asignatura. Se fomentará la participación activa del alumno mediante el planteamiento de cuestiones relacionadas con la aplicación de conceptos y conocimientos previamente adquiridos por el alumno.



- Seminarios.- Esta actividad docente estará dedicada a la resolución de problemas y cuestiones con la participación activa del estudiante.
- Trabajos.- Adicionalmente, cuando el profesor lo considere oportuno, se propondrán trabajos que consistirán en el estudio de un caso práctico, relacionado con alguno de los temas del programa y descrito en una publicación científica.
- Prácticas y talleres.- Las clases se desarrollarán en un laboratorio de informática donde cada alumno llevará a cabo experiencias prácticas que consoliden los conocimientos adquiridos en las clases magistrales y seminarios a través de la aplicación de los mismos. Las prácticas se realizarán preferentemente de forma individual

## EVALUACIÓN

La evaluación de la asignatura se llevará a cabo de una forma continua por parte del profesor a lo largo del curso y constará de los siguientes apartados.

• **Evaluación directa del profesor.** Un 15% de la nota procederá de la evaluación directa del profesor en las clases teóricas y de problemas y en las tutorías. En esta evaluación se tendrán en cuenta distintos aspectos, entre los que cabe destacar:

- Asistencia y participación razonada y clara en las discusiones planteadas.
- Progreso en el uso del lenguaje propio de la asignatura.
- Resolución de problemas y planteamiento de dudas.
- Espíritu crítico.
- Entrega de ejercicios.

• **Evaluación del trabajo realizado por el estudiante.** Se tendrá en cuenta tanto el contenido como la forma. A este apartado le corresponderá un 25% de la nota final.

• **Exámenes y pruebas escritas.** Un 60% de la nota se obtendrá a partir de los resultados de las pruebas escritas.

- Exámenes presenciales de estilo tradicional tanto de cuestiones teóricas como de problemas, y de contenidos relacionados con la materia. Estas cuestiones y problemas serán de tal naturaleza que obliguen al estudiante a relacionar aspectos diferentes que aparezcan en distintos temas de la asignatura o también, si el profesor lo considera oportuno, en diferentes asignaturas de la materia.

- Exámenes no presenciales en los que el profesor entrega directamente, o bien envía mediante correo electrónico, una serie de cuestiones que habrán de ser resueltas por los estudiantes, ya sea individualmente o en grupo, a discreción del profesor. El estudiante/grupo deberá enviar las respuestas al profesor por el mismo conducto antes mencionado y en el plazo que el profesor establezca.





## REFERENCIAS

### Básicas

- An Introduction to Medicinal Chemistry. 4ª Ed., (Oxford University Press. Oxford). By PATRICK G. L. (2009).
- Computational Drug Design (Wiley) by DAVID C. YOUNG, (2009)

### Complementarias

- Physico-Chemical and Computational Approaches to Drug Discovery (RSC Drug Discovery) by Royal Society of Chemistry, Javier Luque, Xavier Barril and David E Thurston, 2012.
- Chemogenomics In Drug Discovery: A Medicinal Chemistry Perspective, (Wiley-VCH), Weinheim, Germany, KUBINYI, H., MULLER, G., 2004.

## ADENDA COVID-19

**Esta adenda solo se activará si la situación sanitaria lo requiere y previo acuerdo del Consejo de Gobierno**

### • Segunda convocatoria

Con motivo de la no presencialidad impuesta por la situación sanitaria, la evaluación de la segunda convocatoria se realizará de forma no presencial. La asignatura ya había terminado sus clases presenciales y se había efectuado la evaluación presencial de la primera convocatoria cuando se decretó el estado de alarma.

Para ello se utilizarán las herramientas de que dispone la plataforma Aula Virtual de la UVEG, que permiten realizar los exámenes no presenciales. La integridad de los exámenes será verificada con el software que proporcione la UVEG. El alumno se identificará con sus claves para acceder al aula virtual.