

**FITXA IDENTIFICATIVA****Dades de l'Assignatura**

Codi	44710
Nom	Química mèdica
Cicle	Màster
Crèdits ECTS	4.0
Curs acadèmic	2022 - 2023

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
2226 - M.U. en Química Orgànica	Facultat de Química	1	Anual

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
2226 - M.U. en Química Orgànica	6 - Química mèdica	Obligatòria

Coordinació

Nom	Departament
DEL POZO LOSADA, CARLOS	325 - Química Orgànica

RESUM

Tant la química mèdica com a química biològica la representen dues de les àrees de treball més recents i dinàmiques de la química orgànica aplicada a l'àrea de la biomedicina, a la comprensió dels sistemes biològics i al desenvolupament de noves estratègies terapèutiques.

L'obtenció de nous fàrmacs, objectiu final de la química mèdica, es complementa en l'actualitat amb la identificació de noves dianes terapèutiques i elucidació dels mecanismes d'acció de les molècules amb activitats farmacològiques d'interès, aquestes contribucions es podrien enquadrar dins de l'àrea de la química biològica.

Per tant, aquesta assignatura tracta d'oferir els aspectes més nous i rellevants en què es treballa

en l'actualitat amb la finalitat de procurar una formació des d'un punt de vista multidisciplinària en una assignatura en la qual es conjuminen conceptes de química orgànica, bioquímica i química computacional.



En aquest mòdul es pretén proporcionar a l'alumne una visió general sobre les tecnologies i estratègies més noves en què la química s'aplica per a obtenir informació i modificar sistemes biològics. Així mateix, es pretén subministrar les bases generals de les noves tècniques i eines metodològiques per al disseny racional de fàrmacs

CONEIXEMENTS PREVIS

Relació amb altres assignatures de la mateixa titulació

No heu especificat les restriccions de matrícula amb altres assignatures del pla d'estudis.

Altres tipus de requisits

Es requereixen coneixements sòlids de Química Orgànica

COMPETÈNCIES

2226 - M.U. en Química Orgànica

- Que els estudiants sàpiguen aplicar els coneixements adquirits i la seua capacitat de resolució de problemes en entorns nous o poc coneguts dins de contextos més amplis (o multidisciplinaris) relacionats amb la seua àrea d'estudi.
- Que els estudiants siguen capaços d'integrar coneixements i afrontar la complexitat de formular judicis a partir d'una informació que, sent incompleta o limitada, incloga reflexions sobre les responsabilitats socials i ètiques vinculades a l'aplicació dels seus coneixements i judicis.
- Que els estudiants sàpiguen comunicar les conclusions (i els coneixements i les raons últimes que les sustenten) a públics especialitzats i no especialitzats d'una manera clara i sense ambigüitats.
- Que els estudiants posseïsquen les habilitats d'aprenentatge que els permeten continuar estudiant d'una forma que haurà de ser en gran manera autodirigida o autònoma.
- Posseir i comprendre coneixements que aportin una base o oportunitat de ser originals en el desenvolupament i / o aplicació d'idees, sovint en un context de recerca.
- Utilitzar les diferents tècniques d'exposició-oral, escrita, presentacions, panells, etc-per comunicar els seus coneixements, propostes i posicions.
- Ser capaços d'accedir a ferramentes d'informació en altres àrees del coneixement i utilitzar-les apropiadament.
- Saber participar en debats i discussions, dirigir-los i coordinar-los i ser capaços de resumir-los i extraure d'ells les conclusions més rellevants i acceptades per la majoria.
- Competències de gestió com ara la capacitat per a la planificació i gestió de temps i recursos, així com per a dirigir i prendre decisions.



- Ser capaços de valorar la necessitat de completar la seua formació científica, en llengües, en informàtica, assistint a conferències o cursos i/o realitzant activitats complementàries, autoavaluant l'aportació que la realització d'estes activitats suposa per a la seua formació integral.
- Comprensió de la relació entre l'estructura dels fàrmacs i la seua activitat.
- Conèixer les principals ferramentes metodològiques que s'apliquen en l'àrea de la química biològica i de la química metgessa i saber quina és la seua utilitat, aplicacions i limitacions.

RESULTATS DE L'APRENTATGE

Els resultats a aconseguir són el coneixement químic dels fàrmacs amb la finalitat de comprendre la relació existent entre estructura química, propietats fisicoquímiques, reactivitat i resposta biològica. Comprensió de les bases per al disseny i desenvolupament de fàrmacs utilitzant diferents eines, entre elles les de bioinformàtica

Dissenyar, seleccionar i/o desenvolupar productes i processos químics eficients (ODS 7) i que minimitzen el seu impacte sobre el medi ambient (ODS 14 i 15), aprofiten matèries primeres alternatives i generen una menor quantitat de residus (ODS 11).

DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1. Química Mèdica i I+D+i farmacèutic

Desenvolupament dels conceptes bàsics en química mèdica i química biològica. Diances terapèutiques: definició, classificació i validació. Identificació i optimització de caps de sèrie. Propietats *ADME. Assajos *preclínicos: seguretat i eficàcia. Diferents models animals transgènics i esporàdics. Assajos clínics: classificació i finalitat. Etapes en el desenvolupament d'un fàrmac. Cost del procés. Punts clau i riscos en el desenvolupament

2. Bases moleculars de l'acció de fàrmacs

Classificació de fàrmacs. Mecanisme d'acció de fàrmacs. Propietats farmacocinètiques. Propietats farmacodinàmiques

3. Descobriment, disseny i desenvolupament de nous fàrmacs

Els productes naturals en química mèdica. Serendipia i potenciació d'activitats inesperades. Quimiotecas i HTS. Aproximacions racionals. Vacunes



4. Avanços en neurofàrmacos

Aplicació de les estratègies en química mèdica i biològica al descobriment i desenvolupament de neurofàrmacos. Definició de neurofarmacos. Malalties neurodegeneratives. Malaltia d'Alzheimer (Cas pràctic: tideglusib. Cas pràctic: NP-61). Malaltia de Parkinson (Cas pràctic: S14). Esclerosi lateral amiotròfica (Cas pràctic: inhibidors de cinases). Esclerosi múltiple (Cas pràctic: TC3.6).

5. De l'estructura a la funció

Introducció a l'estructura 3D de macromolècules. Interaccions macromoleculares. Relació estructura activitat. Bases de dades. Pràctiques i Tallers: Construcció de l'estructura 3D de *ligandos. Estudi de les seues propietats fisicoquímiques, predicció propietats *druglike i visualització i manipulació de complexos fàrmac-receptor. Base de dades *PDB. *Anàlisis d'interaccions lligant-receptor.

6. Disseny de fàrmacs assistit per ordinador

Modelatge de proteïnes. Mètodes d'acoblament automatitzat. Docking. Cribratge virtual. Disseny de novo. Definició de farmacòforo. Cerca de farmacòforo. Relació Estructura Activitat Quantitativa (QSAR) i QSAR3D.

Pràctiques i tallers: Modelatge per homologia. Obtenició d'un model. Estudi de la manera d'unió de diversos ligandos per tècniques de Docking

VOLUM DE TREBALL

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Classes de teoria	20,00	100
Seminaris	20,00	100
TOTAL	40,00	

METODOLOGIA DOCENT

L'assignatura està plantejada perquè l'estudiant siga el protagonista del seu propi aprenentatge. Des del principi de curs els estudiants disposaran de tot el material didàctic necessari i la docència s'estructurarà de la següent manera:

- Classes magistrals (presencials).- En aquestes classes s'introduiran els conceptes bàsics de l'assignatura. Es fomentarà la participació activa de l'alumne mitjançant el plantejament de qüestions relacionades amb l'aplicació de conceptes i coneixements prèviament adquirits per l'alumne.
- Seminaris.- Aquesta activitat docent estarà dedicada a la resolució de problemes i qüestions amb la participació activa de l'estudiant.



- Treballs.- Addicionalment, quan el professor ho considere oportú, es proposaran treballs que consistiran en l'estudi d'un cas pràctic, relacionat amb algun dels temes del programa i descrit en una publicació científica.
- Pràctiques i tallers.- Les classes es desenvoluparan en un laboratori d'informàtica on cada alumne durà a terme experiències pràctiques que consoliden els coneixements adquirits en les classes magistrals i seminaris a través de l'aplicació dels mateixos. Les pràctiques es realitzaran preferentment de forma individual

AVALUACIÓ

L'avaluació de l'assignatura es durà a terme d'una forma contínua per part del professor al llarg del curs i constarà dels següents apartats.

- **Avaluació directa del professor.** Un 15% de la nota procedirà de l'avaluació directa del professor en les classes teòriques i de problemes i en les tutories. En aquesta avaluació es tindran en compte diferents aspectes, entre els quals cal destacar:
 - Assistència i participació raonada i clara en les discussions plantejades.
 - Progrés en l'ús del llenguatge propi de l'assignatura.
 - Resolució de problemes i plantejament de dubtes.
 - Esperit crític.
 - Lliurament d'exercicis.
- **Avaluació del treball realitzat per l'estudiant.** Es tindrà en compte tant el contingut com la forma. A aquest apartat li correspondrà un 25% de la nota final.
- **Exàmens i proves escrites.** Un 60% de la nota s'obtindrà a partir dels resultats de les proves escrites.
 - Exàmens presencials d'estil tradicional tant de qüestions teòriques com de problemes, i de continguts relacionats amb la matèria. Aquestes qüestions i problemes seran de tal naturalesa que obliguen a l'estudiant a relacionar aspectes diferents que apareguen en diferents temes de l'assignatura o també, si el professor ho considera oportú, en diferents assignatures de la matèria.
 - Exàmens no presencials en els quals el professor lliura directament, o bé envia mitjançant correu electrònic, una sèrie de qüestions que hauran de ser resoltes pels estudiants, ja siga individualment o en grup, a discreció del professor. L'estudiant/grup haurà d'enviar les respostes al professor pel mateix conducte abans esmentat i en el termini que el professor establisca



REFERÈNCIES

Bàsiques

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

Complementàries

- 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.