Universidad Zaragoza

Curso Académico: 2021/22

68458 - Química Médica

Información del Plan Docente

Año académico: 2021/22
Asignatura: 68458 - Química Médica
Centro académico: 100 - Facultad de Ciencias
Titulación: 626 - Máster Universitario en Biofísica y Biotecnología Cuantitativa/Biophysics and Quantitative Biotechnology
Créditos: 6.0
Curso: 01
Periodo de impartición: Segundo semestre
Clase de asignatura: Optativa
Materia:

1. Información Básica

1.1. Objetivos de la asignatura

La asignatura y sus resultados previstos responden a los siguientes planteamientos y objetivos:

Uno de los objetivos principales de esta asignatura es proporcionar a los estudiantes una descripción general de la química médica en la intersección entre la química orgánica sintética, la farmacología y la medicina, en su relación con otras especialidades biológicas diferentes con las que se encuentra directamente relacionada y que también se abordan en este máster. En esta asignatura se hará hincapié en aspectos tales como el diseño, la síntesis química y el desarrollo de agentes farmacéuticos o moléculas bioactivas, así como la llegada al mercado de estos compuestos y su patentabilidad. Además, se persigue que los estudiantes se familiaricen con la síntesis de compuestos orgánicos utilizados como medicamentos y que adquieran conocimiento de otras estructuras más complejas como son las proteínas y todos sus derivados. También se buscará que los estudiantes sean capaces de entender el uso de la química orgánica sintética y la química computacional como herramientas estrechamente relacionadas con la química biológica, la enzimología y la biología estructural, con el objetivo de descubrir y desarrollar nuevos agentes terapéuticos.

Así, se identificarán compuestos químicos y familias estructurales clave para su posterior uso terapéutico. Por otro lado, se incluirán aspectos sintéticos y computacionales en el estudio y desarrollo de fármacos y su relación con su actividad biológica, es decir, la comprensión de su relación estructura-actividad (SAR).

Estos planteamientos y objetivos están alineados con los siguientes Objetivos de Desarrollo Sostenible (ODS) de la Agenda 2030 de Naciones Unidas

(https://www.un.org/sustainabledevelopment/es/), de tal manera que la adquisición de los resultados de aprendizaje de la asignatura proporciona capacitación y competencia para contribuir en cierta medida a su logro:

Objetivo 3: Salud y bienestar

Objetivo 4: Educación de calidad

1.2. Contexto y sentido de la asignatura en la titulación

Esta optativa, que pertenece al tercer módulo del máster en el que se incluyen las asignaturas del segundo semestre, permitirá a los alumnos profundizar en su formación como biotecnólogos moleculares, posibilitándoles configurar un currículo personalizado en el que podrán combinar conocimientos instrumentales, metodológicos, estadísticos, modelizadores y/o relativos a la creación y gestión de empresas biotecnológicas.

Esta asignatura optativa es realmente necesaria y coherente en este máster donde, después de que el alumno haya cursado las asignaturas obligatorias del primer cuatrimestre, pueda profundizar en el diseño, obtención y perfeccionamiento de nuevos compuestos para su evaluación biológica, con la finalidad última de establecer relaciones entre la estructura química y la actividad biológica que contribuyan al desarrollo de nuevos fármacos. Con esta asignatura se hará partícipe al alumno de los problemas que conlleva la interacción de los fármacos con el entorno biológico (habitualmente el cuerpo humano) en el que deben ejercer su efecto.

También es fundamental que los alumnos adquieran nociones del funcionamiento de la industria farmacéutica, uno de los sectores industriales más dinámicos que, estando relacionada con la salud, continúa creciendo debido a la demanda social de nuevos medicamentos más eficaces, seguros y personalizados.

Esta asignatura optativa contribuye a dar respuesta a todos estos aspectos que no se abordan en las otras asignaturas del máster.

1.3. Recomendaciones para cursar la asignatura

Es recomendable un seguimiento continuo de la asignatura.

2. Competencias y resultados de aprendizaje

2.1. Competencias

Al superar la asignatura, el estudiante será más competente para:

Competencias básicas:

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.

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.

CB8 - Que los 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.

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.

CB10 - Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.

Competencias específicas:

CE05 - Diseñar ensayos celulares y animales de toxicidad, de biodisponibilidad y de efectividad de compuestos bioactivos.

CE06 - Aplicar técnicas estadísticas para llevar a cabo estudios que relacionen estructura molecular con actividad biológica y permitan generar modelos predictivos.

CE018 - Evaluar el interés de una molécula o estructura biológica determinada como diana terapéutica.

CE019 - Conocer las herramientas básicas de la Química Médica.

CE020 - Diseñar ensayos farmacocinéticos y farmacodinámicos adaptados a compuestos concretos.

CE021 - Aplicar principios de diseño a la mejora de las propiedades ADMET de compuestos candidatos.

CE022 - Entender el proceso de aprobación y comercialización de un fármaco.

Competencias genéricas:

CG01 - Ordenar, analizar críticamente, interpretar y sintetizar información procedente de distintos tipos de fuentes, evaluando su fiabilidad.

CG02 - Desarrollar aplicaciones tecnológicas de los procesos bioquímicos y transferir soluciones a la industria en el sector alimentario, químico, cosmético, farmacéutico y sanitario.

CG03 - Aprender eficientemente mediante el estudio autónomo y adquirir un grado significativo de independencia.

CG04 - Aplicar los conocimientos adquiridos y resolver problemas en entornos nuevos o que le resulten poco familiares dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con el área de estudio.

CG05 - Formular, analizar, evaluar y comparar soluciones nuevas o alternativas para distintos problemas.

CG07 - Desarrollar capacidad para la crítica y la autocrítica.

CG09 - Desarrollar un proyecto, participando en las etapas de búsqueda bibliográfica, planificación de experimentos, obtención de resultados, interpretación, y difusión de los mismos.

2.2. Resultados de aprendizaje

El estudiante, para superar esta asignatura, deberá demostrar los siguientes resultados:

1. Conocer las principales clases de dianas terapéuticas para las que existen fármacos.

2. Conocer las principales herramientas de diseño utilizadas en Química Médica.

3. Conocer los ensayos de ADMET que se efectúan a una molécula candidata para evaluar su potencialidad como fármaco.

4. Conocer las estrategias de la Química Médica para mejorar las propiedades de ADMET de un compuesto.

5. Comprender el itinerario que sigue un compuesto evaluado preclínicamente hasta convertirse en un fármaco comercializado.

2.3. Importancia de los resultados de aprendizaje

Sirven, en primer lugar, para introducir a los estudiantes en el mundo de la química médica y su relación con los fármacos, así como todo el recorrido que estos siguen hasta llegar al mercado.

Permiten al estudiante afrontar la síntesis de un medicamento sencillo dado con las herramientas básicas de diseño en Química Médica (síntesis orgánica y herramientas computacionales).

Proporcionan a los alumnos herramientas de análisis computacional de las características de una molécula biológicamente activa con el fin de establecer relaciones estructura-actividad (SAR).

Todo lo expuesto anteriormente será de gran ayuda para afrontar con éxito el aprendizaje de otras asignaturas del máster y también durante el futuro desarrollo profesional.

3. Evaluación

3.1. Tipo de pruebas y su valor sobre la nota final y criterios de evaluación para cada prueba

El estudiante deberá demostrar que ha alcanzado los resultados de aprendizaje previstos mediante las siguientes actividades de evaluación.

Se llevará a cabo una evaluación continua, no obstante, también se tendrá la opción de realizar la prueba global según el calendario de exámenes de la UZ para las dos convocatorias oficiales.

Las actividades y criterios de evaluación de las que constan la evaluación continua y la prueba global (primera y segunda convocatoria) se describen a continuación.

Evaluación continua

1. Resolución de Problemas y Casos Prácticos (20% de la CF)

La resolución de estos ejercicios constituye un trabajo individual o en grupo de los estudiantes, según se acuerde. La resolución de estos problemas se llevará a cabo en el aula o se les solicitará a los

estudiantes entregarlos al final de cada sesión o en el tiempo designado, siguiendo las pautas y el formato de presentación que se marcará. Las calificaciones y los propios ejercicios corregidos se pondrán a disposición de los estudiantes para su revisión.

2. Examen Teórico (50% de la CF)

La prueba escrita estará constituida por preguntas de tipo test o preguntas que requieran respuestas cortas (pruebas de respuesta limitada) o que exijan un desarrollo amplio del tema (pruebas de ensayo o respuesta libre y abierta).

Para la realización del examen, el alumno podrá consultar la bibliografía presencial que estime oportuna (sin que puedan consultarse páginas webs o similar).

3. Pruebas de evaluación de las sesiones prácticas de ordenador (30% de la CF)

El estudiante ha de demostrar el buen aprovechamiento de las sesiones de prácticas.

Se valorará: 1. El desarrollo de la práctica por parte del alumno: es decir, el modo en que el alumno lleva a cabo la práctica teniendo en cuenta los siguientes criterios: - El alumno es capaz de trabajar de forma autónoma siguiendo el protocolo. 2. El informe presentado al finalizar las prácticas, teniendo en cuenta los siguientes criterios: - Describe de forma conveniente los métodos utilizados - Interpreta de forma correcta los resultados.

4.Actividades complementarias (hasta 1 punto extra sobre la CF)
Las actividades (seminarios, conferencias, debates, etc.) que se puedan proponer con carácter voluntario podrán suponer una nota extra sobre la calificación final de la asignatura de hasta un máximo de 1 punto.

CF = 0.20 N$_{\text{Resolución Problemas}}$**+ 0.50 N**$_{\textbf{Examen Teórico}}$ **+ 0.30 N**$_{\textbf{Sesiones Prácticas}}$

Evaluación global (100% de la CF)
1. Examen Teórico (100% de la CF)

La prueba escrita estará constituida por preguntas de tipo test o preguntas que requieran respuestas cortas (pruebas de respuesta limitada) o que exijan un desarrollo amplio del tema (pruebas de ensayo o respuesta libre y abierta).

Para la realización del examen en la evaluación global, el alumno no podrá consultar la bibliografía.

CF = 1 N$_{\textbf{Examen Teórico}}$

Así pues, la **calificación global (CG)** de la asignatura será la de la **calificación final (CF)**, calculada como la media ponderada de las actividades de evaluación descritas + la **posible nota extra** derivada de las actividades complementarias. La **nota extra** mencionada **sólo se sumará a la CF si ésta es mayor o igual a 4 puntos** sobre 10, tanto en primera, como en segunda convocatoria. La CG no podrá en ningún caso, superar la calificación numérica de 10.

CG** = CF + PUNTUACIÓN EXTRA (AC)**

*** La **calificación global (CG)** resultará de la adición a CF de la nota extra (hasta 1 punto), obtenida de las tareas complementarias realizadas con carácter voluntario. Estos sólo se sumarán si CF es igual o mayor a 4, en ambas convocatorias

En la evaluación de las pruebas descritas se **valorará positivamente** la exactitud, rigurosidad y planteamiento de las respuestas, así como la argumentación y análisis crítico de las mismas. Igualmente, se valorará la comprensión de los conceptos y procesos, y la capacidad de interrelacionarlos, así como la concreción, la claridad, el orden y la presentación.

Si se detecta y confirma **plagio** u otras acciones fraudulentas, será motivo suficiente para la calificación con la nota más baja posible de la prueba correspondiente.

La evaluación de esta asignatura está planificada para su realización de forma **presencial**, siempre y cuando sea posible. En caso contrario, y siguiendo las directrices marcadas en su caso, se adaptarán las actividades de evaluación para posibilitar su realización en remoto, intentando mantener, en la medida de lo posible, la tipología y criterios que se exponen aquí.

4. Metodología, actividades de aprendizaje, programa y recursos

4.1. Presentación metodológica general

El proceso de aprendizaje que se ha diseñado para esta asignatura se basa en **clases expositivas** de carácter participativo que se complementarán con clases de **problemas**, **seminarios** (podrán ser impartidos por profesionales), **prácticas de ordenador y tutorías**. Se expondrán los contenidos teóricos del temario de la asignatura, así como ejemplos prácticos que clarifiquen los conceptos expuestos.

4.2. Actividades de aprendizaje

El programa que se ofrece al estudiante para ayudarle a lograr los resultados previstos comprende las siguientes actividades:

Lección magistral

Clases magistrales expositivas participativas impartidas por el profesor. También podrán intervenir expertos externos y/o los propios alumnos.

Resolución de problemas y casos

El profesor propondrá problemas y casos prácticos para su resolución individual o en grupos. Las posibles soluciones a los problemas planteados se pondrán en común, promoviéndose la participación de los alumnos. Además de lo anterior, el profesor propondrá problemas y casos prácticos como tareas a realizar por el alumno.

Prácticas de laboratorio

Los alumnos realizarán prácticas de informática correspondientes al programa de prácticas. Estas actividades instruirán al alumno en cómo abordar las técnicas experimentales o los métodos computacionales, presentar datos y resultados proporcionados por la aplicación de estos. Finalmente, los resultados serán puestos en común y discutidos con los compañeros. Esta parte de la asignatura requiere de un trabajo individual por parte del alumno. Estas actividades permitirán al alumno adquirir la capacidad y destrezas necesarias para describir, cuantificar, analizar y evaluar críticamente los resultados obtenidos, así como para utilizar de forma autónoma las técnicas experimentales y métodos relacionados con este Master y diseñar alternativas técnicas y metodológicas.

Debates, seminario y conferencias

Tutela personalizada profesor-alumno

Trabajo autónomo del alumno

Pruebas de evaluación

4.3. Programa

Programa de teoría

MÓDULO I. Dianas de fármacos y fármacos

1- Enzimas y receptores como dianas farmacológicas

2- Ácidos nucleicos y otras dianas farmacológicas

3- Agentes antimicrobianos

4- Agentes anticancerígenos

5- Fármacos para el sistema nervioso central

6-Otros fármacos

MODULO II. Herramientas básicas en Química Médica

7- Encontrar compuestos cabecera

8- Síntesis combinatoria

9- Fármacos quirales y su síntesis

10- (Q)SARs para guiar la Química Médica

11- Ordenadores en Química Médica

MODULO III. Caracterización del fármaco: farmacocinética y farmacodinámica

12- Caracterización química de los compuestos cabecera

13- Farmacocinética y farmacodinámica

14- Seguridad y Toxicología

15- Modelos animales de enfermedad

MÓDULO IV. Estrategias químicas para mejorar los fármacos

16- Mejora de la solubilidad y de la afinidad por la diana

17- Mejora de la estabilidad química y de la metabólica

18- Mejora de la unión de proteínas y de la permeabilidad

19- Disminución de la toxicidad

20- Mejora de la administración (profármacos y encapsulación)

MÓDULO V. De la droga al paciente

21- Propiedad intelectual y patentes en el descubrimiento de fármacos

22- Fundamentos de los ensayos clínicos

23- Llevar la droga al mercado

24- Ejemplos ilustrativos en descubrimiento de fármacos

Nota: El orden de estos temas puede cambiar, en función de las necesidades docentes y de organización.

Programa de prácticas. El alumno realizará una práctica de tipo A o una práctica de tipo B

Práctica tipo A. Durante 7 sesiones informáticas de 3 horas, el alumno convertirá una molécula (*hit*), activa frente a una diana de estructura conocida, en un *lead,* abordando idealmente todo lo siguiente:

- Diseño de una ruta sintética del hit que facilite la síntesis de derivados
- Cálculo de su solubilidad y sus propiedades ADMET
- A la vista de estas propiedades y de la actividad farmacológica deseada: propuesta de variantes mejoradas mediante diseño de derivados o mediante búsqueda de análogos por similitud, subestructura o farmacóforo
- Propuesta de una formulación y un protocolo de administración para el ensayo de su actividad farmacológica en un modelo animal
- Redacción de una solicitud de patente
- Diseño de un ensayo clínico de Fase I

Práctica tipo B. Durante 7 sesiones informáticas de 3 horas, el alumno se encargará de rediseñar un fármaco proteico para tratar de:

- Mejorar la estabilidad proteica (solubilidad, estabilidad conformacional, tendencia a agregación, presencia de secuencias de proteólisis o de modificación)
- Incorporar, si procede, funcionalidades de vehiculización celular
- Planear estrategias de optimización de su afinidad por la diana.

El alumno diseñará una nueva secuencia del fármaco proteico que, con los menos cambios posibles, resuelva los problemas iniciales de la molécula. También diseñará un vector de expresión adecuado para producir el fármaco de forma recombinante. En el caso de tener que diseñar una vacuna, en

lugar de un vector de expresión se diseñará un vector de inmunización.

Nota: El programa de prácticas podría verse ligeramente alterado, en función de las necesidades docentes y de organización.

4.4. Planificación de las actividades de aprendizaje y calendario de fechas clave

Calendario de sesiones presenciales y presentación de trabajos

Se trata de una asignatura de 6 ECTS que está programada dentro del grupo de las optativas que se pueden cursar en el segundo semestre del primer curso del Máster de Biofísica y Biotecnología Cuantitativa.

Toda la información sobre **horarios** y **calendario de exámenes** se publica en la web de la Facultad de Ciencias.

En reprografía y/o a través del **Anillo Digital Docente** se proporcionará al alumno diverso material docente.

La docencia de esta asignatura está planificada para su realización de forma **presencial**, siempre y cuando sea posible. En caso contrario, y siguiendo las directrices marcadas en su caso, se adaptarán las actividades de aprendizaje para posibilitar su realización en remoto, intentando mantener, en la medida de lo posible, la tipología que se expone aquí.

4.5. Bibliografía y recursos recomendados

http://psfunizar10.unizar.es/br13/egAsignaturas.php?codigo=68458