UCA
Universidad de Cádiz

Master en Química Médica

Facultad de Ciencias

Guía Docente
Asignaturas Obligatorias

Curso 2019-2020

Ficha de asignatura 2019-2020

DATOS DE ASIGNATURA

Código	272001		
Asignatura	Técnicas de Caracterización Estructural de Biomoléculas. Química Computacional	Créditos teóricos	6
Título:	Máster en Química Médica	Créditos Prácticos	
Módulo	Común	Créditos ECTS totales	6
Materia	Análisis y Determinación Estructural de Moléculas Bioactivas	Tipo	Obligatoria
Departamento	Química Orgánica, Química Inorgánica, Química Física y Química Analítica	Modalidad: PRESENCIAL	
Semestre	1º	Curso	1º

Requisitos previos y recomendaciones

Requisitos previos

No se establecen requisitos previos

Recomendaciones

Profesorado

Nombre	Apellidos	Categoría	Coordinador
Rosa María	Varela Montoya	Catedrática	Coordinadora
Ascensión	Torres Martínez	Titular	
Manuel	Jiménez Tenorio	Catedrático	

Miguel	Palma Lovillo	Catedrático	
David	Zorrilla Cuenca	Titular	
Andrés	García Algarra	Profesor Ayudante Doctor	

Competencias

(cumplimentar según Memoria del Máster)

Identificador	Competencia	Tipo
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.	Básica
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.	Básica
CG01	Poseer los conocimientos, habilidades y actitudes que posibilitan la comprensión de nuevas teorías, interpretaciones, métodos y técnicas dentro de los diferentes campos disciplinares, conducentes a satisfacer de manera óptima las exigencias profesionales.	General
CG03	Identificar, analizar, y definir los elementos significativos que constituyen un problema para resolverlo con rigor.	General
CG09	Describir, cuantificar, analizar y evaluar de forma crítica los resultados experimentales obtenidos de forma autónoma, proponer hipótesis y ponerlas a prueba	General
CE01	Poseer los conocimientos, habilidades y actitudes que posibilitan la adquisición e interpretación de datos espectroscópicos y su aplicación a la resolución de estructuras moleculares.	Específica
CE02	Adquirir la capacidad de realizar búsquedas bibliográficas de datos espectroscópicos para confirmar la estructura propuesta para un compuesto.	Específica
CE10	Conocer y saber aplicar aspectos avanzados de la metodología analítica para la identificación y cuantificación de biomoléculas.	Específica

Resultados del aprendizaje

Identificador	Resultado
R1	Conocer los principales métodos espectroscópicos para la elucidación estructural de compuestos bioactivos y la información que se puede adquirir por cada uno de estos métodos.

R2	Reconocer las principales características espectroscópicas de compuestos bioactivos modelo con interés en biomedicina.
R3	Aplicar las técnicas de determinación estructural a la resolución de problemas elegidos dentro del campo de la biomedicina.
R4	Comprender los métodos de química computacional usados en el estudio de biomoléculas y ser capaz de usarlos adecuadamente para el estudio de la estructura molecular, las propiedades espectroscópicas y la reactividad química.
R5	Comprender la componente teórica de un estudio combinado experimental/computacional y valorar la relevancia de la aportación teórica.
R6	Aplicar los conceptos derivados de la química computacional al análisis y resolución de problemas en el ámbito de las biomoléculas, así como a la comprensión de su síntesis, estructura y reactividad.

Actividades formativas

(cumplimentar según Memoria del Máster)

Actividad formativa	Horas	Grupo	Detalle	Competencias a desarrollar
Clases de teoría	36		Exposición de contenidos mediante presentación o explicación por parte del profesorado. Desarrollo de ejemplos en la pizarra o con ayuda de medios audiovisuales.	CB10, CG09, CE01, CE10
Clases prácticas	10		Engloba resolución de problemas, ejercicios y casos prácticos vinculados con los contenidos teóricos, realizados en grupos grandes o pequeños, pudiendo incluir ejercicios de simulación con software específico. Actividades prácticas realizadas en grupos pequeños en laboratorios especializados de las distintas materias o en aulas de informática.	CG03, CB7, CE01, CE02, CE10
Tutoría individual y/o en grupo	20		Esta actividad, de carácter presencial o virtual, es aquella que se refiere al seguimiento del alumnado y al seguimiento grupal del aprendizaje. En general, es una actividad para asesorar, resolver dudas, orientar, realizar el seguimiento de los conocimientos adquiridos, etc. Además, es una actividad en la que se podrá promover el aprendizaje cooperativo y pudiendo realizarse tanto en grupos grandes como en grupos pequeños. Las tutorías también se pueden desarrollar haciendo uso de la plataforma virtual de la que dispone la universidad.	CB10, CE10

Trabajo autónomo del estudiante	82		Estudio autónomo de los contenidos teórico-prácticos de la materia, preparación de trabajos, búsquedas bibliográficas y documental y, en general, todo el trabajo relacionado con los seminarios, tutorías colectivas, conferencias, visitas a empresas, etc.	CB10, CE02
Actividades de evaluación y autoevaluación	2		Estas actividades, de carácter presencial, son las dedicadas a evaluar los conocimientos adquiridos por los estudiantes para demostrar la adquisición de las competencias. Para las evaluaciones se podrán usar o no las plataformas virtuales, dependiendo de la asignatura, para lo cual el alumno tendrá el asesoramiento oportuno (seminario o prácticas) para el uso de dichas plataformas.	CG03, CG09, CB7, CB10, CE01, CE02, CE010

Total de actividades formativas de docencia presencial: 48
Total de otras actividades: 102
Total de la asignatura: 150

Sistema de evaluación

Criterios generales de evaluación

La adquisición de competencias se llevará a cabo mediante un procedimiento de evaluación continua, con actividades a lo largo del desarrollo de la asignatura.

Procedimientos de evaluación *(cumplimentar según Memoria del Máster)*

Tarea/actividad	Medios, técnicas e instrumentos	Evaluador/es	Competencias a evaluar
Presentación de trabajos y actividades	Realización de actividades propuestas por el profesor, que permitan realizar el seguimiento del aprendizaje adquirido por el alumno. Exposiciones orales realizadas sobre un tema concreto o la presentación de un trabajo escrito desarrollado. Actividades y trabajos a realizar presencialmente en clase, por escrito o mediante el Campus Virtual.	Profesores de la asignatura	CB10, CE01, CB7, CG09, CE02
Pruebas escritas	Exámenes realizados para determinar la adquisición de las distintas competencias, tanto exámenes finales, como pruebas de conocimientos mínimos que vayan confirmando la adquisición de las mismas, en grupos grandes o pequeños.	Profesores de la asignatura	CG03, CB7, CE01, CE010

Procedimiento de calificación *(cumplimentar según Memoria del Máster)*

La calificación consiste en: Realización de trabajos y actividades: 30% Pruebas escritas: 70%

Descripción de contenidos

Descripción de contenidos	Competencias relacionadas	Resultados del aprendizaje relacionados
Resonancia Magnética nuclear. Espectrometría de masas y técnicas acopladas. Rayos X: Métodos de Difracción aplicados a la determinación estructural de biomoléculas. Ejercicios y ejemplos del uso conjunto de las técnicas espectroscópicas en la determinación estructural de moléculas bioactivas. Introducción a la química computacional. Fundamentos de mecánica molecular. Métodos computacionales para el estudio de las reacciones químicas. Interacciones moleculares de biomolécula-sustrato mediante simulación computacional. Predicción de propiedades moleculares. Aplicación al estudio de la estructura, reactividad y mecanismos de reacción. Programas de aplicación en química computacional.	Todas	Todos

Bibliografía y fuentes electrónicas

Bibliografía básica

R.M. Silverstein, F.X. Webster, D.J. Kiemle, D.L. Bryce. "Spectrometric Identification of Organic Compounds", 8ª edición, John Wiley and Sons, 2015.

María-Magdalena Cid, Jorge Bravo. "Structure Elucidation in Organic Chemistry. The Search for the Right Tools". Wiley, VCH, 2015.

J.B. Lambert, H.F. Shurvell, D.A. Lightner, R. Graham Cooks, "Organic Structural Spectroscopy", 2ª ed., Prentice Hall, 2017.

P. Crews, M. Jaspar, J. Rodríguez, "Organic Structure Analysis", 2ª edición, Oxford University Press, 2010.

L.M. Harwood, T.D.W. Claridge, "Introduction to Organic Spectroscopy", Oxford University Press, 1997.

E. de Hoffmann, V. Stroobant. "Mass Spectrometry. Principles and Applications". J. Wiley and Sons, 3rd edition, 2007.

K. Hiraoka. "Fundamentals of Mass Spectrometry". Springer. 2013.

E.A.V. Ebsworth, D.W.H. Rankin, S. Cradock. "Structural Methods in Inorganic Chemistry". 2ª ed. Blackwell, Oxford, 1991.

James B. Foresman and Æleen Frisch: Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods.

L. Andrew. "Molecular Modelling: Principles and Applications".

F. Jensen. "Introduction to Computational Chemistry" 3rd Edition, John Wiley &. Sons, Inc., Chichester, 2017.

C. J. Cramer. "Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models", 2ª ed.

L. Piela, Ideas of Quantum Chemistry, Elsevier, Oxford, 2007.

Bibliografía específica

R.M. Smith, “Understanding Mass Spectra: A Basic Approach”, Wiley, 2ª edición, 2004.
B. Ardrey, “Liquid-chromatography-Mass spectrometry: An introduction”, John Wiley & Sons, 2003.
H. Günzler, H. Gremlich, “IR Spectroscopy: An Introduction”, Wiley-VCH, 2002.
E. Breitmaier, “Structure Elucidation by NMR in Organic Chemistry. A Practical Guide”, John Wiley & Sons, 2002.
J.H.Gross, “Mass Spectrometry”. 3rd edition, Springer. 2017
J.A. Iggo. “NMR Spectroscopy in Inorganic Chemistry”. Oxford Chemistry Primers, Oxford University Press, 1999.
G.H. Stout and L.H. Jensen. X-Ray Structure Determination. A Practical Guide.2nd. Ed. John Wiley & Sons. 1989.
J. Bermúdez Polonio. “Métodos de Difracción de Rayos X”. Ed. Pirámide. 1981.
L. Di, E. Kerns, Drug-Like Properties, Second Edition: Concepts, Structure Design and Methods from ADME to Toxicity Optimization, Academic Press, London, 2016.
D. C. Young. Computational Drug Design. A Guide for Computational and Medicinal Chemists. John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, 2009.

Bibliografía ampliación

D. Shikka, R. Awasthi, “Application of I.R. Spectroscopy & Mass Spectrometry in Structural Elucidation of Drugs”, *Int. J. Adv. Res. in Chem. Science* 2015, *2*, 38-45.
R. C. Breton, W. F. Reynolds “Using NMR to identify and characterize natural products”, *Nat. Prod. Rep.* 2013, *30*, 501-524.
S. L. Schreiber, T. M. Kapoor, G. Wess. Chemical Biology: From Small Molecules to Systems Biology and Drug Design. WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KgaA, Weinheim, 2007.

RECURSOS ONLINE (RMN)
MESTRENOVA: https://mestrelab.com/download/mnova//
SPINWORKS: http://home.cc.umanitoba.ca/~wolowiec/spinworks/
PREDICTION OF NMR SPECTRA: https://www.nmrdb.org/
PREDICTION NMR OF PROTEINS: http://www.shiftx2.ca/

RECURSOS ONLINE (RAYOS X)
(IUCr) Crystallography Journals Online: journals.iucr.org
IUCr - International Union of Crystallography: www.iucr.org
SHELX Program Page: shelx.uni-ac.gwdg.de/SHELX/
CCDC. Cambridge Crystallographic Data Centre. Organic and Organometallic Compounds: www.ccdc.cam.ac.uk
ICSD - Inorganic Crystal Structure Database: http://www.fiz-karlsruhe.de/icsd.html
RCSB Protein Data Bank - RCSB PDB: www.rcsb.org/

Comentarios/observaciones adicionales

Mecanismos de control y seguimiento

Encuestas satisfacción alumnado
Reuniones de coordinación

Ficha de asignatura 2019-2020

DATOS DE ASIGNATURA			
Código	272002		
Asignatura	Fuentes Naturales y Estrategias Sintéticas de Fármacos y Compuestos Bioactivos	Créditos teóricos	6
Título:	Máster en Química Médica	Créditos Prácticos	
Módulo	Común	Créditos ECTS totales	6
Materia	Química Molecular aplicada a la terapéutica con fármacos y compuestos bioactivos	Tipo	Obligatoria
Departamento	Química Orgánica Química Inorgánica	Modalidad: PRESENCIAL	
Semestre	1º	Curso	1º

Requisitos previos y recomendaciones

Requisitos previos

No se establecen requisitos previos

Recomendaciones

Profesorado

Nombre	Apellidos	Categoría	Coordinador
Nuria	Chinchilla Salcedo	Prof. Ayudante Doctor	Sí

Rosario	Hernández Galán	Catedrática de Universidad	No
Francisco	Guerra Martínez	Prof. Titular	No
María Jesús	Ortega Agüera	Prof. Titular	No
Isaac	De los Ríos Hierro	Prof. Titular	No
Javier	Moreno Dorado	Prof. Titular	No

Competencias

(cumplimentar según Memoria del Máster)

Identificador	Competencia	Tipo
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.*	Básica
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*	Básica
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.*	Básica
CG01	*Poseer los conocimientos, habilidades y actitudes que posibilitan la comprensión de nuevas teorías, interpretaciones, métodos y técnicas dentro de los diferentes campos disciplinares, conducentes a satisfacer de manera óptima las exigencias profesionales.*	General
CG02	*Demostrar una buena capacidad de acceder por búsquedas electrónicas en bases de datos a la literatura científico-técnica.*	General
CE05	*Conocer los principios básicos en farmacología: farmacodinámia y farmacocinética.*	Específica
CE06	*Conocer las dianas terapéuticas de los fármacos y la evolución temporal de los mismos.*	Específica
CE07	*Habituar al alumno al método científico utilizado en la investigación y desarrollo de nuevos medicamentos ciencias biomédicas.*	Específica
CE08	*Conocer los principales modelos in vivo e in vitro utilizados en investigación farmacológica.*	Específica

CE09	*Demostrar una buena capacidad de comprender y criticar la literatura científica relacionada con la Química Molecular.*	Específica
CE10	*Conocer y saber aplicar aspectos avanzados de la metodología analítica para la identificación y cuantificación de biomoléculas.*	Específica
CE11	*Conocer y saber emplear correctamente la metodología científico-técnica de uso común en Química Molecular para la resolución de problemas.*	General

Resultados del aprendizaje

Identificador	Resultado
R1	Conocer las principales fuentes de moléculas bioactivas y la metodología para su aislamiento y caracterización.
R2	Conocer las principales rutas biosintéticas.
R3	Manejar las diferentes estrategias sintéticas de moléculas bioactivas.
R4	Conocer la importancia de la catálisis asimétrica y su aplicación a la síntesis

Actividades formativas
(cumplimentar según Memoria del Máster)

Actividad formativa	Horas	Grupo	Detalle	Competencias a desarrollar
Clases teóricas	35		Exposición de contenidos mediante presentación o explicación por parte del profesorado. Desarrollo de ejemplos en la pizarra o con ayuda de medios audiovisuales.	CE05, CE06, CE07, CE10, CE11
Clases prácticas	10		Engloba resolución de problemas, ejercicios y casos prácticos vinculados con los contenidos teóricos, realizados en grupos grandes o pequeños, pudiendo incluir ejercicios de simulación con software específico. Actividades prácticas realizadas en grupos pequeños en laboratorios especializados de las distintas materias o en aulas de informática.	CB7, CB8, CB9, CG02, CE11
Seminarios	2		Actividades en la que se profundiza en un tema (monográfico) o se amplía y relacionan los contenidos impartidos en las sesiones magistrales con la actividad profesional, también pueden organizarse mediante conferencias.	CB7, CG02, CB8, CB9, CE11

Tutoría individual y/o en grupo:	5		Esta actividad, de carácter presencial o virtual, es aquella que se refiere al seguimiento del alumnado y al seguimiento grupal del aprendizaje. En general, es una actividad para asesorar, resolver dudas, orientar, realizar el seguimiento de los conocimientos adquiridos, etc. Además, es una actividad en la que se podrá promover el aprendizaje cooperativo y pudiendo realizarse tanto en grupos grandes como en grupos pequeños. Las tutorías también se pueden desarrollar haciendo uso de la plataforma virtual de la que dispone la universidad.	CG01, CG02, CE10
Trabajo autónomo del estudiante	97		Estudio autónomo de los contenidos teórico-prácticos de la materia, preparación de trabajos, búsquedas bibliográficas y documental y, en general, todo el trabajo relacionado con los seminarios, tutorías colectivas, conferencias, visitas a empresas, etc.	CB01, CB02, CB7, CB9
Actividades de evaluación y autoevaluación	1		Estas actividades, de carácter presencial, son las dedicadas a evaluar los conocimientos adquiridos por los estudiantes para demostrar la adquisición de las competencias. Para las evaluaciones se podrán usar o no las plataformas virtuales, dependiendo de la asignatura, para lo cual el alumno tendrá el asesoramiento oportuno (seminario o prácticas) para el uso de dichas plataformas.	CB7, CE09, CE10

Total de actividades formativas de docencia presencial: 48
Total de otras actividades: 102
Total de la asignatura: 150

Sistema de evaluación

Criterios generales de evaluación

La adquisición de competencias se llevará a cabo mediante un procedimiento de evaluación continua, con actividades a lo largo del desarrollo de la asignatura.

Procedimientos de evaluación *(cumplimentar según Memoria del Máster)*

Tarea/actividad	Medios, técnicas e instrumentos	Evaluador/es	Competencias a evaluar

Presentación de trabajos y actividades.	Realización de actividades propuestas por el profesor, presencialmente o mediante el campus virtual, que permitan realizar el seguimiento del aprendizaje adquirido por el alumno. Exposiciones orales realizadas sobre un tema concreto o la presentación de un trabajo escrito desarrollado.	Todos los profesores	CB7, CB9, CG02, CE07, CE08, CE09, CE11
Pruebas escritas.	Exámenes realizados para determinar la adquisición de las distintas competencias, tanto exámenes finales, como pruebas de conocimientos mínimos que vayan confirmando la adquisición de las mismas, en grupos grandes o pequeños.	Todos los profesores	CB7, CB8, CG01, CE05, CE06, CE08, CE10, CE11

Procedimiento de calificación *(cumplimentar según Memoria del Máster)*

La calificación consiste en: Realización de trabajos y actividades: **30**% Pruebas escritas: **70**%

Descripción de contenidos

Descripción de contenidos	Competencias relacionadas	Resultados del aprendizaje relacionados
Fuentes naturales de sustancias bioactivas. Los productos naturales como fuentes de nuevos fármacos. Moléculas bioactivas y fármacos de origen terrestre y marino. Microorganismos como fuentes de fármacos. Productos naturales como estructuras privilegiadas. Fármacos quirales. Importancia de la quiralidad en terapéutica. Eutómero y Distómero. Fármacos racémicos frente a fármacos enantioméricamente puros. Fundamentos químicos en procesos biológicos: reacciones básicas en química de productos naturales. Transformaciones químicas: quimiomodulación y quimioinducción de la actividad biológica. Ejemplos. Aportación de la genómica a la biosíntesis de PN. Metabolitos crípticos, Técnicas OSMAC, Epigenética química, otras estrategias para activar genes silentes. Avances en el estudio de las principales rutas biosintéticas: métodos en el estudio de rutas biosintéticas. Estrategias biosintéticas para la obtención de Productos Naturales y Productos inspirados en ellos. Ejemplos de estudios biosintéticos. Perspectiva histórica. Herramientas de síntesis orgánica. Aspectos retrosintéticos. Grupos protectores. Desconexiones 1,3 y 1,5-diX. Desconexiones 1,2 y 1,4-diX. Formación de enlaces múltiples. Síntesis mediante reacciones pericíclicas. Síntesis mediante reacciones radicalarias. Síntesis basadas en el paladio. Síntesis asimétrica: Fármacos quirales. Reactivos, auxiliares y catalizadores	Todas	Todos

quirales. Nuevos métodos de formación de enlaces C-C y C-X. Ejemplos aplicados a fármacos. Catalizadores organometálicos en Síntesis Orgánica: Catálisis homogénea y heterogénea. Ventajas e inconvenientes de ambos. Reacciones catalíticas. Reagrupamientos esqueletales, metátesis de olefinas o isomerizaciones de valencia asistida como pasos intermedios en la síntesis de fármacos. Metales de transición en la síntesis de compuestos con actividad biológica: Síntesis seleccionadas de moléculas bioactivas con complejos de Rutenio, Cobalto y Niquel. Química Bioorganometálica: origen y principios básicos. Compuestos organometálicos en Medicina. Estrategias en la síntesis de moléculas bioactivas y fármacos: Química combinatorial (QC): Quimiotecas. Síntesis de quimiotecas en fase sólida. Reacciones multicomponentes. Síntesis orientadas a la diversidad (DOS), Síntesis orientada por la diana (TOS), Síntesis orientada por la biología (BIOS), otras estrategias. Estudio de síntesis de moléculas bioactivas y principales fármacos. Síntesis industrial de fármacos representativos: Escalado de fármacos. Química click. Fármacos fluorados		

Bibliografía y fuentes electrónicas

Bibliografía básica

1. Curso de Iniciación a la Química Organometálica. Gabino A. Carriedo y Daniel M. San José. Publicaciones de la Universidad de Oviedo. 1995
2. Dewick P.M. "Medicinal natural products. A Byosinthetic approach" 2nd Ed. Willey, 2002.
3. D.J. Newman and G.M. Cragg". Naturlal products as sources of new drugs over 30 years from 1981 to 2010" J. Nat. Prod. 2012, 75, 311-335.
4. G.M Cragg , P.G. Grothaus and D.J. Newman "Impact of natural products on developing new anti-cancer agents" Chem. Rev. 2009, 109, 3012-3043.
5. M. S. Butler "Natural products to drugs: natural products-derived compounds in clinical trials" Nat. Prod. Rep. 2005, 22,162-195; Nat. Prod. Rep. 2006, 23, 131; Nat. Prod. Rep. 2008, 25,475-616.
6. M. S. Butler "The role of natural products chemistry in drug discovery". J. Nat. Prod. 2004, 67, 2141-2153
7. S. Komiya, Ed. "Synthesis of Organometallic Compounds", Ed. John Wiley and Sons, Chichester, 2002.
8. M. Schlosser, Ed. "Organometallics in Synthesis. A Manual". Ed. John Wiley and Sons, Chichester, 2001
9. Andersson, P. G., Innovative Catalysis in Organic Synthesis: Oxidation, Hydrogenation, and C-X Bond Forming Reactions, Wiley-VCH, 2012.

Bibliografía específica

1. Third, Completely Revised and Extended Edition By Christoph Elschenbroich (Philipps-Universität Marburg). Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KgaA: Weinheim. 2006. ISBN 3-527-29390-6.
2. M. J. Coster; S. A. Charman; M. D. Edstein; T. S. Skinner-Adams; K.T. Andrews; I. D. Jenkins; R. J. Quinn; "Total Synthesis of Thiaplakortone A: Derivatives as Metabolically Stable Leads for the Treatment of Malaria18" Chem. Lett. 2014, 5, 178-182.
3. K. C. Nicolaou and E. Sorensen, "Classics in Total Synthesis". Ed. VCH, Weinheim, 1995.
4. E. J. Corey and X. M. Cheng, The Logic of Chemical Synthesis, Ed. John Wiley and Sons, New York, 1995.
5. S. Warren and P. Wyatt, "Organic Synthesis: The Disconnection Approach", Ed. John Wiley and Sons, Padstow, 2008

6. K. Scherlach and C. Hertweck. “Triggering cryptic natural product biosynthesis in microorganisms.” Org. Biomom. Chem., 2009, 7, 1753-1760.
7. J. Begani, J. Lakhani, D. Harwani. Current strategies to induce secondary metabolites from microbial biosynthetic cryptic gene clusters. Anals of Microbiology., 2018, 68, 419-432.
8. J. C. Zarins-Tutt, T. Triscari Barberi, H. Gao. A. Mearns-Spragg, L. Zhang, D. J. Newman and R. J. Goss. Prospecting for new bacterial metabolites: a glossary of approaches for inducing, activating and upregulating the biosynthesis of bacterial cryptic or silent natural product. Nat. Prod. Rep. 2016, 33, 54-72.

Bibliografía ampliación

1. Leach A.R. Molecular Modeling: Principles and Applications, Prentice Hall 2001.
2. Van de Waterbeemd H., Testa B. Computer-Assisted Lead Finding and Optimization: Current Tools for Medicinal Chemistry, John Wiley & Sons, 1997.
3. Leach A.R. Molecular Modeling: Principles and Applications, Prentice Hall, 2001.
4. Química Organometálica. Didier Astruc. 1ª Edición. Ed. Reverté, 2003.
5. F.A. Carey and R. J. Sundberg, Advanced Organic Chemistry, Part A, Ed. Springer Science, New York, 2007.
6. F.A. Carey and R. J. Sundberg, Advanced Organic Chemistry, Part B, Ed. Springer Science, New York, 2007.
7. M. B. Smith and J. March, “March’s Advanced Organic Chemistry: Reactions, Mechanisms and Structure”, Ed. John Wiley and Sons, Hoboken, New Jersey, 2013.

Comentarios/observaciones adicionales

Mecanismos de control y seguimiento

Encuestas satisfacción alumnado
Reuniones de coordinación

Ficha de asignatura 2019-2020

DATOS DE ASIGNATURA

Código	272003		
Asignatura	Química Biológica. Estrategias en el Diseño de Fármacos y Compuestos Bioactivos	Créditos teóricos	6
Título:	Máster en Química Médica	Créditos Prácticos	
Módulo	Común	Créditos ECTS totales	6
Materia	Química Molecular Aplicada a la Terapéutica con Fármacos y Compuestos Bioactivos	Tipo	Obligatoria
Departamento	Química Orgánica Química Inorgánica	Modalidad: PRESENCIAL	
Semestre	1º	Curso	1º

Requisitos previos y recomendaciones

Requisitos previos

Estar en posesión de un título universitario oficial español u otro expedido por una institución de educación superior del Espacio Europeo de Educación Superior que facultan en el país expedidor del título para el acceso a enseñanzas de máster.

Recomendaciones

Estar en posesión de un título universitario del área de Ciencias e Ingeniería: Química, Biotecnología, Farmacia, Biología, Bioquímica, Biomedicina y Medicina u otras disciplinas de las Ciencias Experimentales y de la Salud que deseen adquirir experiencia profesional o especializarse en el ámbito de estas disciplinas.
Aquellos alumnos pertenecientes a titulaciones no pertenecientes al área de Ciencias e Ingeniería deberán cursar complementos de formación relativos a asignaturas básicas de Química General, Laboratorio Integrado de Química y Química Orgánica, de entre las asignaturas ofertadas por el centro para las titulaciones de grado.

Profesorado

Nombre	Apellidos	Categoría	Coordinador
José Manuel	Botubol Ares	Profesor Sustituto Interino	
Juan Carlos	García Galindo	Profesor Titular	
Manuel	García Basallote	Catedrático de Universidad	
Antonio José	Macías Sánchez	Catedrático de Universidad	
Profesorado externo			

Competencias

(cumplimentar según Memoria del Máster)

Identificador	Competencia	Tipo
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.	Básica
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.	Básica
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.	Básica
CG01	Poseer los conocimientos, habilidades y actitudes que posibilitan la comprensión de nuevas teorías, interpretaciones, métodos y técnicas dentro de los diferentes campos disciplinares, conducentes a satisfacer de manera óptima las exigencias profesionales.	General
CG02	Demostrar una buena capacidad de acceder por búsquedas electrónicas en bases de datos a la literatura científico-técnica.	General
CG10	Entender de forma integrada los aspectos técnicos, físico-químicos, bioquímicos, biológicos y económicos de procesos de producción en la industria Química, Farmacéutica, Biotecnológica, Cosmética, etc.	General
CE05	Conocer los principios básicos en farmacología: farmacodinámica y farmacocinética.	Específica
CE06	Conocer las dianas terapéuticas de los fármacos y la evolución temporal de los mismos.	Específica

CE07	Habituar al alumno al método científico utilizado en la investigación y desarrollo de nuevos medicamentos ciencias biomédicas.	Específica
CE08	Conocer los principales modelos in vivo e in vitro utilizados en investigación farmacológica.	Específica
CE09	Demostrar una buena capacidad de comprender y criticar la literatura científica relacionada con la Química Molecular.	Específica
CE10	Conocer y saber aplicar aspectos avanzados de la metodología analítica para la identificación y cuantificación de biomoléculas.	Específica
CE11	Conocer y saber emplear correctamente la metodología científico-técnica de uso común en Química Molecular para la resolución de problemas.	Específica

Resultados del aprendizaje

Identificador	Resultado
R1	Conocer las principales vías de obtención de prototipos y compuestos cabeza de series.
R2	Reconocer las principales modificaciones estructurales que conducen a moléculas bioactivas.
R3	Conocer las rutas metabólicas de los fármacos y su aplicación al diseño de fármacos.
R4	Manejar los conceptos básicos de la interacción fármaco-diana.
R5	Conocer los aspectos básicos de la química bioorgánica y bioinorgánica.

Actividades formativas

(cumplimentar según Memoria del Máster)

Actividad formativa	Horas	Grupo	Detalle	Competencias a desarrollar
Clases teóricas	70		Exposición de contenidos mediante presentación o explicación por parte del profesorado. Desarrollo de ejemplos en la pizarra o con ayuda de medios audiovisuales.	Todas
Clases prácticas	20		Engloba resolución de problemas, ejercicios y casos prácticos vinculados con los contenidos teóricos, realizados en grupos grandes o pequeños, pudiendo incluir ejercicios de simulación con software específico. Actividades prácticas realizadas en grupos pequeños en laboratorios especializados de las distintas materias o en aulas de informática.	Todas
Seminarios	4		Actividades en la que se profundiza en un tema (monográfico) o se amplía y relacionan los contenidos impartidos en las sesiones magistrales con la actividad profesional, también pueden organizarse mediante conferencias.	Todas
Tutoría individual y/o en grupo	10		Esta actividad, de carácter presencial o virtual, es aquella que se refiere al seguimiento del alumnado y al seguimiento grupal del aprendizaje.	Todas

			En general, es una actividad para asesorar, resolver dudas, orientar, realizar el seguimiento de los conocimientos adquiridos, etc. Además, es una actividad en la que se podrá promover el aprendizaje cooperativo y pudiendo realizarse tanto en grupos grandes como en grupos pequeños. Las tutorías también se pueden desarrollar haciendo uso de la plataforma virtual de la que dispone la universidad.	
Trabajo autónomo del estudiante	194		Estudio autónomo de los contenidos teórico-prácticos de la materia, preparación de trabajos, búsquedas bibliográficas y documental y, en general, todo el trabajo relacionado con los seminarios, tutorías colectivas, conferencias, visitas a empresas, etc.	Todas
Actividades de evaluación y Autoevaluación	2		Estas actividades, de carácter presencial, son las dedicadas a evaluar los conocimientos adquiridos por los estudiantes para demostrar la adquisición de las competencias. Para las evaluaciones se podrán usar o no las plataformas virtuales, dependiendo de la asignatura, para lo cual el alumno tendrá el asesoramiento oportuno (seminario o prácticas) para el uso de dichas plataformas.	Todas

Total de actividades formativas de docencia presencial: 96 horas
Total de otras actividades: 204 horas
Total de la asignatura: 300 horas

Sistema de evaluación

Criterios generales de evaluación

La adquisición de competencias se llevará a cabo mediante un procedimiento de evaluación continua, con actividades a lo largo del desarrollo de la asignatura.

Procedimientos de evaluación *(cumplimentar según Memoria del Máster)*

Tarea/actividad	Medios, técnicas e instrumentos	Evaluador/es	Competencias a evaluar
Presentación de trabajos y actividades	Realización de actividades propuestas por el profesor, presencialmente o mediante el campus virtual, que permitan realizar el seguimiento del aprendizaje adquirido por el alumno. Exposiciones orales realizadas sobre un tema concreto o la presentación de un trabajo escrito desarrollado.	Todo el profesorado	Todas
Pruebas escritas	Exámenes realizados para determinar la adquisición de las distintas competencias, tanto exámenes finales, como pruebas de conocimientos mínimos que	Todo el profesorado	Todas

	vayan confirmando la adquisición de las mismas, en grupos grandes o pequeños.		

Procedimiento de calificación *(cumplimentar según Memoria del Máster)*

La calificación consiste en: Presentación de trabajos y actividades, pruebas escritas.

Descripción de contenidos

Descripción de contenidos	Competencias relacionadas	Resultados del aprendizaje relacionados
Espacios químico y biológico. Química genética directa e inversa. Compuestos cabezas de serie. Búsqueda de prototipos. Modificaciones estructurales de compuestos cabezas de series. El farmacóforo. SAR y QSAR. Diseño electrónico de moléculas bioactivas. Diseño directo e indirecto (Doking y Linking). Metabolismo de fármacos. Reacciones de fase I y II. Diseño de fármacos basados en procesos metabólicos. Profármacos transportadores y profármacos bioprecursores. Ensayos preclínico y clínicos. Química Bioinorgánica. Metaloenzimas: aspectos generales de su estructura y función biológica. Oxigenasas, catalasas y peroxidasas. Catálisis bioinspirada de reacciones de oxidación. Hidrogenasas. Metaloenzimas con actividad hidrolítica. Aplicaciones farmacológicas de compuestos inorgánicos.	Todas	Todos

Bibliografía y fuentes electrónicas

Bibliografía básica

Cohen, N. C. Molecular Modeling in Drug Design, Academic Press, San Diego, 1995.
Leach, A. R. Molecular Modeling. Principles and Applications. 2ª ed. Pearson, Essex, 2001.
W. Lalow, U. A.Meyer, R. F. Tyndale. Pharmacogenomics. In Drugs and the Pharmaceutical Sciences (Series of Textbooks and Monographs). Vol 113. J Swarbrick (ed.) AAI Inc, Wilmington, North Carolina, USA.

Bibliografía específica

Patrick GL. An introduction to medicinal chemistry. 5a ed. Oxford: Oxford University Press; 2013.
Delgado A, Minguillón C, Joglar J. Introducción a la química terapéutica. 2a ed. Madrid: Díaz de Santos; 2003.
Richard B. Silverman, Mark W. Holladay (2014) "The Organic Chemistry of Drug Design and Drug Action", tercera edición, Elsevier Academic Press.
Wermuth CG, editor. The practice of medicinal chemistry. 4a ed. Amsterdam: Elsevier /Academic Press; 2015.

Bibliografía ampliación

Comentarios/observaciones adicionales

Mecanismos de control y seguimiento

-Encuestas satisfacción alumnado
-Reuniones de coordinación

Ficha de asignatura 2019-2020

DATOS DE ASIGNATURA

Código	272004		
Asignatura	Bases Moleculares y Biológicas de las Patologías Humanas	Créditos teóricos	6
Título:	Máster en Química Médica	Créditos Prácticos	
Módulo	Común	Créditos ECTS totales	6
Materia	Bases Moleculares y Biológicas de las Patologías Humanas	Tipo	Obligatoria
Departamento	Biomedicina, Biotecnología y Salud Pública	Modalidad: PRESENCIAL	
Semestre	1º	Curso	1º

Requisitos previos y recomendaciones

Requisitos previos

No existen requisitos previos

Recomendaciones

Se recomienda adquirir unos conocimientos básicos de fisiología, bioquímica e inmunología

Profesorado

Nombre	Apellidos	Categoría	Coordinador

Carmen	Castro González	Profesora Titular de Universidad	SI
Mónica	García Alloza	Profesora Titular de Universidad	NO
Enrique	Aguado Vidal	Profesor Titular de Universidad	NO
Cecilia Matilde	Fernández Ponce	Profesora Ayudante Doctora	NO
Félix Alejandro	Ruiz Rodríguez	Profesor Titular de Universidad	
Carmen	Piñuela Rojas	Profesora Contratada Doctora	
Carmen	Gómez Gómez	Profesora Contratada Doctora	

Competencias

(cumplimentar según Memoria del Máster)

Identificador	Competencia	Tipo
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	Básica
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	Básica
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.	Básica
CG2	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	General
CG4	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.	General

CG10	Interpretar los resultados experimentales a la luz de las teorías aceptadas y emitir hipótesis conforme al método científico y defenderlas de forma argumentada.	General
CG8	Ser capaz de adoptar decisiones de forma eficaz en el desarrollo de su labor profesional y/o investigadora.	General
CE4	Seleccionar la instrumentación y recursos informáticos adecuados para el estudio a realizar y aplicar sus conocimientos para utilizarla de manera correcta.	Específica
CE5	Planificar y desarrollar proyectos y experimentos, así como relacionar entre sí distintas especialidades científicas (carácter interdisciplinar).	Específica
CE6	Elaborar una memoria clara y concisa de los resultados de su trabajo y de las conclusiones obtenidas así como exponer y defender públicamente el desarrollo, resultados y conclusiones de su trabajo de una manera clara y concisa.	Específica
CT1	Que el estudiante conozca la necesidad de completar su formación científica en idiomas e informática mediante la realización de actividades complementarias.	Transversal
CT2	Que el estudiante sepa utilizar herramientas de información y comunicación que permitan plantear y resolver problemas nuevos dentro de contextos relacionados con su área de estudio.	Transversal

Resultados del aprendizaje

Identificador	Resultado
R1	Conocer las principales moléculas implicadas en el desarrollo de los procesos moleculares y celulares que determinan el desarrollo de cáncer, así como los mecanismos de acción de las terapias específicas para el tratamiento de cáncer.
R2	Conocer el metabolismo del aminoácido metionina y su importancia en las reacciones de metilación celular que determinan la expresión génica, la actividad de proteínas, lípidos y otras moléculas.
R3	Conocer el papel de dos moléculas inorgánicas: el óxido nítrico y el polifosfato en los procesos de hemostasia y coagulación, así como en el desarrollo de patologías como la trombosis y la aterosclerosis.
R4	Conocer el papel de los neurotransmisores en los procesos de comunicación nerviosa, así como las bases moleculares de algunas alteraciones del sistema nervioso central y de los procesos neurodegenerativos.
R5	Conocer los mecanismos moleculares de las enfermedades autoinmunes.
R6	Conocer el papel de las proteínas y los ácidos nucléicos en el desarrollo de terapias

	para el tratamiento de cáncer, enfermedades del sistema inmune, enfermedades neurodegenerativas o cardiovasculares.

Actividades formativas
(cumplimentar según Memoria del Máster)

Actividad formativa	Horas	Grupo	Detalle	Competencias a desarrollar
02. Prácticas, seminarios y problemas	48	Único	Clase magistral. Resolución de problemas. Participación espontánea del alumno en las clases.	
10. Actividades formativas no presenciales	92	Único	Tutorías no presenciales: el alumno podrá contactar con los profesores de la asignatura para resolver dudas. Acceso al material docente disponible para los alumnos. Acceso a cuestiones y problemas a resolver y a cuestiones resueltas. Preparación de materiales y estudio de la asignatura.	
11. Actividades formativas de tutorías	2	Único	Tutorías presenciales o virtuales en función de las necesidades del alumno y a realizar en el horario disponible de los	

			profesor es de la asignatura.	
12. Actividades de evaluación	8	Único	Entrega de actividades de evaluación continua propuestas por los profesores.	

Total de actividades formativas de docencia presencial: 48
Total de otras actividades: 102
Total de la asignatura: 150

Sistema de evaluación

Criterios generales de evaluación

La adquisición de competencias se llevará a cabo mediante un procedimiento de evaluación continua, con actividades a lo largo del desarrollo de la asignatura.

Procedimientos de evaluación *(cumplimentar según Memoria del Máster)*

Tarea/actividad	Medios, técnicas e instrumentos	Evaluador/es	Competencias a evaluar
Evaluación continua.	Elaboración de esquemas o respuesta a cuestiones propuestas por los profesores para distintos temas por parte de los alumnos.	Todos	Todas
Realización del Examen Final.	Prueba de preguntas teóricas de desarrollo, resolución de problemas, cuestiones y/o preguntas multi-respuesta en función de los objetivos de la asignatura.	Todos	Todas
Exposición pública de los trabajos realizados	Presentación en el aula de trabajos científicos proyectos de investigación	Todos	Todas
Realización de trabajos de investigación	Los alumnos realizarán trabajos relacionados con los contenidos que se calificarán entre ellos.	Todos	Todas

Procedimiento de calificación *(cumplimentar según Memoria del Máster)*

Se realizará una evaluación continua a través de las diversas actividades mencionadas y una prueba global. La nota final será el resultado de considerar varios apartados:

1) Prueba final de carácter global: 70% de la nota final. La prueba global constará de varias cuestiones o problemas y/o preguntas de respuesta múltiple, o de presentaciones orales y será imprescindible aprobarla para superar la asignatura y que se considere la evaluación continua.

2) Evaluación continua: 30% de la nota final.

Descripción de contenidos

Descripción de contenidos	Competencias relacionadas	Resultados del aprendizaje relacionados
Cancer: Macromoléculas implicadas en estas patologías: ácidos nucleicos. Alteraciones químicas de los ácidos nucleicos implicadas en el desarrollo de cáncer: metilaciones y acetilaciones. Cáncer: Macromoléculas implicadas en estas patologías: proteínas. Alteraciones químicas de las proteínas implicadas en el desarrollo de cáncer: fosforilaciones. Principales vías de señalización y sus alteraciones. Enfermedades inflamatorias y enfermedades autoinmunes. Bases moleculares. (6 horas) Células, órganos y tejidos implicados en patologías inflamatorias y autoinmunes. Terapias asociadas. Bases moleculares de las enfermedades cardiovasculares y de algunas enfermedades raras. Alteraciones químicas de las proteínas implicadas en el desarrollo de las enfermedades cardiovasculares: metilaciones, oxidaciones, nitrosilaciones. Bases moleculares del envejecimiento y la neurodegeneración. Importancia del diagnóstico precoz, principales marcadores y búsqueda de nuevos marcadores. Alternativas terapéuticas. Neurogénesis y neurorregeneración. Terapia génica y terapia celular en el sistema nervioso. Proteínas terapéuticas.	Todas	Todos

Bibliografía y fuentes electrónicas

Bibliografía básica

PURVES. *Neurociencias*. 2007

BEAR. Neuroscience. *La exploración del cerebro*. 2008

ALBERTS, B., y cols. *Biología Molecular de la Célula*. Omega, 1996

BEAR, M.F.,y cols. *Neurociencia: Una exploración del cerebro.* Masson, 1998

PURVES y cols. *Invitación a la Neurosciencia*. Panamericana, 2006

LEHNINGER. *Principios de Bioquímica*. Tercera edición. Omega, 2001

SILVERTHORN D. *Fisiología Humana* 2008

BERNE Y LEVY. *Fisiología*. 2009

BEST Y TAYLOR. *Bases Fisiológicas de la Práctica Médica*. 2010

GUYTON, A. C. *Tratado De Fisiología Médica*. 2006

BAKER. *At the Bench A laboratory navigator*

SAMBROOK y col. Molecular *Cloning: a laboratory manual*

Bibliografía específica

- Gene Therapy. Mauro Giacca. Springer-Verlag, 2010.
- Regenerative Medicine and Cell Therapy. JF Stoltz (ed). IOS press, 2012.
- Understanding Nanomedicine: An Introductory Textbook. Rob Burgess. Pan Stanford Publishing, 2012.

Bibliografía ampliación

KANDEL. *Principios de Neurociencia*. 2008

- Essentials of Stem Cell Biology, Second Edition. R Lanza, J Gearhart, B Hogan, D Melton, R Pedersen, ED Thomas, J Thomson and I Wilmut (eds). Academic Press-Elsevier, 2009.
- Principles of Regenerative Medicine. A Atala, R Lanza, J Thomson, R Nerem (eds). Academic -Press-Elsevier, 2008.

Comentarios/observaciones adicionales

Mecanismos de control y seguimiento

Las actividades de evaluación continua, las tutorías y las preguntas elaboradas por los alumnos servirán de base para la introducción de cambios estratégicos y/o de contenidos.

Se recabará a través del campus virtual el estado de satisfacción de los alumnos con la asignatura y las sugerencias para diseñar mejoras.

También se utilizarán las encuestas de la Unidad de Calidad para verificar la satisfacción de los alumnos con la asignatura y el diseño de posibles mejoras.

Asimismo, las reuniones de coordinación del máster serán de utilidad como mecanismos de seguimiento y control.