### ASIGNATURA DE MÁSTER:



# QUÍMICA TERAPÉUTICA

(Código: 21151183)

## 1.PRESENTACIÓN

La Química Terapéutica está dirigida fundamentalmente al estudiantado que pretende dirigir su actividad profesional hacia la investigación o desarrollo de nuevos medicamentos. Es una asignatura que estudia la interacción química-vida en la que intervienen gran variedad de ciencias y tecnologías, por lo que proporciona un conjunto de conocimientos de gran interés que permitirá desarrollar a las/los futuros profesionales su actividad con mayor competencia, tanto en el ámbito académico como empresarial o industrial.

Los fármacos son aquellas estructuras moleculares que presentan una actividad biológica determinada asociada a una baja toxicidad, son los principios activos, y se convierten en medicamentos cuando se incorporan a una forma farmacéutica para su administración.

Los fármacos son generalmente pequeñas moléculas que interfieren o interaccionan con diferentes biomoléculas; la acción principal deriva de la interacción con una de ellas, la diana farmacológica; pero las reacciones adversas son consecuencia de las que ocurren con otras similares o diferentes. Únicamente conocer la naturaleza de este reconocimiento hará posible determinar y en definitiva controlar el mantenimiento y propagación de la vida.

## 2.CONTEXTUALIZACIÓN

La Química Terapéutica es una asignatura que se encuadra en el módulo IV "Química Orgánica" perteneciente al Master en Ciencia y Tecnología Química incluido dentro del Programa de Posgrado en Química. Esta asignatura prepara a las/los estudiantes para conocer las bases moleculares de la acción de los fármacos y se complementa con las otras cinco asignaturas que pertenecen al módulo.

Está dirigida fundamentalmente al estudiantado que pretende dirigir su actividad profesional hacia la investigación o desarrollo de nuevos medicamentos. Es una asignatura que estudia la interacción química-vida en la que intervienen gran variedad de ciencias y tecnologías, por lo que proporciona un conjunto de conocimientos de gran interés que permitirá desarrollar a las/los futuros profesionales su actividad con mayor competencia, tanto en el ámbito académico como empresarial o industrial

La investigación en química terapéutica es cara. Se calcula que hacen falta de 10 a 12 años desde que se descubre una molécula hasta que se comercializa el correspondiente fármaco y sólo una de cada 60.000 estructuras estudiadas llega a ser comercializada.

El profesorado que imparte la asignatura posee experiencia docente acreditada y amplia actividad investigadora en Química Orgánica, Heterociclos, Reconocimiento Molecular, Desarrollo de Nuevos Fármacos (antiparasitarios, antifúngicos, antivirales, inhibidores enzimáticos, etc.), Enlaces de Hidrógeno y Técnicas de RMN y Cristalografía, con numerosas publicaciones en revistas ISI y comunicaciones en congresos nacionales e internacionales. Además son Doctoras Vinculadas del Instituto de Química Médica del CSIC.

## **3.REQUISITOS PREVIOS RECOMENDABLES**

Aunque al Master acceden estudiantes de muy diversas titulaciones, para cursar la asignatura de Química Terapéutica es requisito indispensable tener conocimientos de Química Orgánica. Así mismo, el conocimiento de la lengua inglesa será también un requisito para cursar la asignatura.

### **4.RESULTADOS DE APRENDIZAJE**

Los objetivos de aprendizaje que se pretende que alcancen las/los estudiantes a través de su trabajo en la asignatura Química Terapéutica se recogen el la siguiente tabla:

Conocimientos	Habilidades y destrezas	Actitudes	Objetivos de aprendizaje a desarrollar
x			Describir distintos modos de acción de los fármacos en el organismo.
		х	Diferenciar el modo de acción de un fármaco según la estructura que presente.
	Х		Diseñar nuevas estructuras de fármacos con una posible actividad determinada.
Х			Describir y comentar los métodos que se utilizan en la actualidad en el diseño de nuevos fármacos.
Х			Explicar las técnicas utilizadas en la optimización de prototipos.
Х			Saber aplicar los métodos actuales utilizados en el diseño de fármacos atendiendo a consideraciones bioquímicas, farmacocinéticas, farmacodinámicas y de metabolismo.
Х			Describir las técnicas analíticas utilizadas en síntesis y análisis de fármacos.
Х		×	Analizar, interpretar y discutir casos bibliográficos de descubrimiento de medicamentos de importancia social.
		х	Predecir la posible actividad biológica de un derivado de una cabeza de serie.
	Х		Diseñar la síntesis orgánica más conveniente de un fármaco.
	Х		Transmitir conocimientos sobre diseño de fármacos.

Estos objetivos junto con la metodología de trabajo en el curso se orienta a que el estudiantado alcance las siguientes competencias y destrezas de carácter transversal:

- · Capacidad de aprendizaje autónomo
- · Capacidad en la resolución de problemas y toma de decisiones
- · Creatividad en la generación de ideas
- · Capacidad de gestión de la información científica y tecnológica
- · Capacidad de análisis, organización y planificación
- · Desarrollo de habilidades de comunicación científica
- · Razonamiento crítico y científico



· Conocimientos de las aplicaciones multimedia e Internet relativos al ámbito de estudio

#### **5.CONTENIDOS DE LA ASIGNATURA**

El curso se organiza en dos bloques temáticos con un total de veinte temas. El primer bloque, que incluye los temas 1 a 8 corresponde al estudio de los criterios y métodos de trabajo utilizados en la búsqueda de estructuras modelo y su manipulación, resaltando la importancia de la modificación estructural en la absorción, distribución, metabolismo y excreción (ADME).

El segundo bloque temático, temas 9 a 19, contempla ejemplos representativos de diseño de fármacos en función de las dianas biológicas con las que interaccionan: enzimas, receptores específicos o los que interfieren en procesos biológicos de transporte. El último tema se dedica a la aplicación de la metodología sintética orgánica a los fármacos, con especial énfasis en la preparación de fármacos enantioméricamente puros.

## **BLOQUE TEMÁTICO I**

- Tema 1. Conceptos básicos. Nomenclatura de fármacos
- Tema 2. Evolución de los métodos de búsqueda y descubrimiento de fármacos
- Tema 3. Dianas biológicas, farmacológicas, receptores
- Tema 4. Correlaciones cualitativas estructura química-actividad biológica
- Tema 5. Correlaciones cuantitativas estructura química-actividad biológica
- Tema 6. Modelado molecular y diseño de fármacos.
- Tema 7. Metabolismo de fármacos
- Tema 8. Profármacos y sus aplicaciones

## **BLOQUE TEMÁTICO II**

- Tema 9. Inhibidores enzimáticos quimioterápicos
- Tema 10. Inhibidores enzimaticos que interfieren en la biosíntesis de las paredes celulares
- Tema 11. Inhibidores enzimáticos farmacodinámicos
- Tema 12. Fármacos que alteran el transporte de las membranas celulares
- Tema 13. Fármacos que actúan sobre receptores adrenérgicos, dopaminérgicos y serotoninérgicos
- Tema 14. Fármacos que actúan sobre receptores de acetilcolina
- Tema 15. Fármacos que actúan sobre receptores de aminoácidos y péptidos
- Tema 16. Fármacos que actúan sobre receptores de histamina y adenosina
- Tema 17. Fármacos que actúan sobre receptores de hormonas esteroideas, tiroideas y otros
- Tema 18. Fármacos que interactúan con ácidos nucleicos
- Tema 19. Fármacos que actúan a través de la formación de radicales
- Tema 20. Síntesis de fármacos. metodologías sintéticas. Fármacos enantioméricamente puros

## **6.EQUIPO DOCENTE**

- M.a DEL PILAR CABILDO MIRANDA
- ROSA M CLARAMUNT VALLESPI
- **DOLORES SANTA MARIA GUTIERREZ**

## 7.METODOLOGÍA

La Metodología está basada fundamentalmente en una enseñanza a distancia de carácter virtual. El estudiantado deberá disponer de la plataforma de e-Learning para el aprendizaje y la colaboración a través de Internet. Esta plataforma proporcionará el interfaz adecuado de interacción entre estudiantes y equipo docente.



El material para el estudio de los contenidos teóricos se encuentra recogido en los textos que se incluyen en la bibliografía básica. Además, el estudiantado dispondrá, a través del curso virtual, de una serie de documentos en diferentes formatos (texto, presentaciones PowerPoint, artículos científicos, direcciones web, etc.) que podrá utilizar para el estudio de determinados temas o como material complementario. Todo ello será indicado con antelación suficiente por el equipo docente.

La asignatura no tiene clases presenciales, salvo 10 horas de carácter experimental, que se realizarán en sesión de un único día en la Sede Central de la UNED en Madrid, en el Departamento de Química Orgánica y Bio-Orgánica.

<u>Plan de Trabajo</u>

## 8.BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

ISBN(13): 9788436248906
Título: FÁRMACOS Y MEDICAMENTOS (2003)
Autor/es: Claramunt R. M.; Cabildo Miranda, Mª Del Pilar; Escolástico León, Consuelo; Jiménez, A.;
Santa María Gutiérrez, Mª Dolores;
Editorial: UNED

Buscarlo en librería virtual UNED

Buscarlo en bibliotecas UNED

Buscarlo en la Biblioteca de Educación

Buscarlo en Catálogo del Patrimonio Bibliográfico

ISBN(13): 9788448603618
Título: INTRODUCCIÓN A LA QUÍMICA FARMACÉUTICA (2001)
Autor/es: Avendaño López, María Del Carmen;
Editorial: McGraw-Hill / Interamericana de España, S.A.

Buscarlo en libreria virtual UNED

Buscarlo en bibliotecas UNED

Buscarlo en la Biblioteca de Educación

Buscarlo en Catálogo del Patrimonio Bibliográfico

#### Nomenclatura y Problemas:

- Avendaño, M. C.; Llama, E. F., Menédez, J. C., Pedregal, C., M. Söllhuber, M.: Ejercicios de Química Farmacéutica. Editorial McGraw-Hill, Interamericana, ISBN: 844860184X, Madrid, 1997. ISBN: 844860184X.
- Mauleón, D. y Delgado, A.: Manual de Nomenclatura Sistemática de Fármacos. Editorial Promociones y Publicaciones universitarias, Barcelona, 1987.
- Monge, A.: Química Farmacéutica en Problemas. Editorial Eunsa, Pamplona, 1996.
- O'Neil, M. J., Heckelman, P. E., Koch, C. B., Roman, K. J., Kenny, C. M., D'Arecca, M. R.: The Merck Index: An Encyclopedia of chemicals, drugs and biologicals, 14 a edición. Editorial Merck & Co., Inc. Whitehouse Station, N. J., 2006. ISBN: 978-0-911910-00-1

#### Libros

- Abraham, D. J. (Editor): Burger's Medicinal Chemistry and Drug Discovery, 6a edición, 6 volúmenes. Editorial Wiley, New York, 2003. ISBN: 978-0-471-37032-1.
- Cabildo, P., García, A., López, C. y Santa María, M. D., Química Orgánica. ED. UNED, 1999. ISBN: 84-362-3809-5.
- Corey, E. J., Czakó, B., Kürti, L.: Molecules and Medicine. Editorial Wiley, Hoboken, N.J., 2007. ISBN: 978-0-470-26096-8.
- Delgado Cirilo, A., Minguillón Llombart, C., Joglar Tamargo, J.: Introducción a la Química Terapéutica, 2ª edición. Editorial Promociones y Publicaciones Universitarias, ISBN: 8479786019, Barcelona, 2003.
- Delgado Cirilo, A., Minguillón Llombart, C., Joglar Tamargo, J.: Introducción a la Síntesis de Fármacos, 1ª edición. Editorial Síntesis, Barcelona, 2003. ISBN-13: 9788497560290
- Galbis Pérez, J. A.: Panorama Actual de la Química Farmacéutica, 1ª edición. Editorial Universidad de Sevilla, Sevilla, 2000. ISBN: 9788447208531
- Hansch, A. (Editor): Comprehensive Medicinal Chemistry, 6 volumenes. Editorial Pergamon Press, Oxford, 1990. ISBN: 978-
- Raviña, E.: Medicamentos, Vol I y II. Ed. Universidad de Santiago de Compostela. ISBN 978-84-9887-007-7. 2008.
- Krogsgaard-Larsen, P., Liljefors, T., Madsen, U. (Editores): Textbook of Drug Design and Discovery, 3a edición. Editorial Taylor and Francis, New York, 2002.
- Taylor, J. B., Triggle, D. J. (Editors): Comprehensive Medicinal Chemistry II, 8 volúmenes. Editorial Elsevier, Oxford, 2006. ISBN-13: 978-0-08-044513-7.
- Thomas, G.: Medicinal Chemistry, 2ª edición. Editorial Wiley, Chichester, 2007.

## 10.RECURSOS DE APOYO AL ESTUDIO

Las/los estudiantes contarán con-

La infraestructura y equipamientos generales del Departamento de Química Orgánica y Bio-Orgánica y de la Facultad de Ciencias (laboratorios, equipos, etc.).

Los fondos bibliográficos y documentales disponibles en las bibliotecas de la UNED, tanto de la Sede Central como de Centros Asociados. Así mismo, a través de la web de la Biblioteca de la UNED, el/la estudiante podrá consultar numerosas



revistas científicas en formato electrónico

Las TIC disponibles dentro del programa de virtualización de las enseñanzas regladas de la UNED.

En el curso virtual también encontrará otros recursos como: presentaciones en powerpoint, artículos científicos, direcciones web, etc.

### 11.TUTORIZACIÓN Y SEGUIMIENTO

La tutorización se hará a través del Curso Virtual mediante Foros creados al efecto.

- Foro de Estudiantes. En él los estudiantes se podrán intercambiar información y experiencias sobre cualquier cuestión. Queremos resaltar que se trata de un foro no moderado y, por tanto, el equipo docente no se responsabiliza de las informaciones dadas a conocer en el mismo.
- Foro Guardia Virtual. Foro de comunicación entre el estudiante y el equipo docente para la resolución de dudas relacionadas con la asignatura.
- Tablón de Anuncios. En dicho tablón, el equipo docente podrá difundir cualquier cuestión relevante acerca de la asignatura. El estudiante, de este modo, podrá acceder a la información que el profesorado envíe pero no podrá utilizarse de forma recíproca, es decir, el alumno no podrá mandar mensajes al equipo docente a través de este

Además existe la posibilidad de contactar con el Equipo Docente mediante los siguientes teléfonos y correos electrónicos:

Ma del Pilar Cabildo Miranda 91 398 73 21

pcabildo@ccia.uned.es

Rosa Mª Claramunt Vallespí 91 398 73 22

rclaramunt@ccia.uned.es

Dolores Santa María Gutierrez 91 398 73 36

dsanta@ccia.uned.es

## 12.EVALUACIÓN DE LOS APRENDIZAJES

- 1. La evaluación continua de la asignatura, de acuerdo con la metodología de la enseñanza universitaria a distancia, se llevará a cabo por medio de:
  - Dos Pruebas de Evaluación a Distancia (PEDs 1 y 2) que constarán de una serie de cuestiones teóricas y de problemas de comprensión de contenidos del programa, a cumplimentar y resolver.
  - Una Tercera Prueba de Evaluación a Distancia (PED 3) que consistirá en el desarrollo de un tema sobre cualquier aspecto relacionado con el diseño de fármacos.
  - Asistencia a la sesión presencial única de 10 horas en la Sede Central para la realización de las prácticas correspondientes.
- 2. La valoración de cada una de estas actividades, se tendrá en cuenta lo siguiente:



- En las PEDs 1 y 2: la corrección de la respuesta, el razonamiento dado a la misma y la forma de exponerlo.
- En la PED 3: relevancia del Tema elegido, actualidad y estructuración del mismo, bibliografía utilizada, etc.
- En la Jornada Presencial de prácticas: trabajo y elaboración del informe correspondiente.

En todas las Pruebas, se valorará la redacción y presentación de las mismas.

Las PEDs estarán a disposición del estudiantado en el curso virtual a comienzos de curso y se les indicará las fechas de presentación. Así mismo, se utilizará el curso virtual como vía de comunicación entre estudiantes y equipo docente para tratar los otros aspectos.

- 3. La calificación final será el resultado de la siguiente ponderación de cada una de las actividades de evaluación:
  - PED 1, 2 y 3: contribuirán con un 30% cada una.
  - Jornada Presencial y elaboración del informe: 10%.

## **13.COLABORADORES DOCENTES**

Véase equipo docente.

el "Codigo Seguro de Verificación (CSV)" en la dirección https://sede.uned.es/valida/