

MÓDULO	MATERIA	ASIGNATURA	CURSO	SEMESTRE	CRÉDITOS	CARÁCTER
1	12	Investigación y Desarrollo de Fármacos	2017-2018	Primero y segundo	4	Obligatoria
PROFESOR(ES)			DIRECCIÓN COMPLETA DE CONTACTO PARA TUTORÍAS (Dirección postal, teléfono, correo electrónico, etc.)			
M ^a Encarnación Camacho Quesada M ^a Dora Carrión Peregrina			Dpto. Química Farmacéutica y Orgánica Facultad de Farmacia. Campus de Cartuja s/n 18071 Granada Tfno.: 958-243844 y 958-240728 e-mail: ecamacho@ugr.es e-mail: dcarrion@ugr.es			
			HORARIO DE TUTORÍAS			
			M.E. Camacho: Lunes, Martes y Jueves de 11.30 a 13.30h. M.D. Carrión: Martes, Jueves y Viernes de 9.30 a 11.30h.			
MÁSTER EN EL QUE SE IMPARTE			OTROS MÁSTERES A LOS QUE SE PODRÍA OFERTAR			
MÁSTER UNIVERSITARIO EN INVESTIGACIÓN, DESARROLLO, CONTROL E INNOVACIÓN DE MEDICAMENTOS						
PRERREQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES (si procede)						
Conocimientos fundamentales de Química Orgánica Conocimientos fundamentales de Química Farmacéutica Conocimientos fundamentales de Farmacología Conocimientos de Inglés						
BREVE DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS (SEGÚN MEMORIA DE VERIFICACIÓN DEL MÁSTER)						
Etapas en la I+D+i de los medicamentos. Farmacoeconomía. Búsqueda de prototipos o cabezas de serie: Del azar al diseño racional de fármacos. Aspectos químicos para la modificación de la LADME en los medicamentos: profármacos y fármacos duros o blandos. Bases químicas de la farmacocinética, formulación y toxicidad de los fármacos. La farmacomodulación como primer intento de racionalización en el desarrollo de fármacos. Descripción de distintas dianas biológicas, segundos mensajeros, transducción de señales, enzimas e inhibidores enzimáticos. Relaciones						



estructura/actividad de los fármacos. Importancia de la quiralidad y análisis conformacional en la interacción fármaco-receptor. Descripción de parámetros electrónicos, estéricos e hidrofóbicos para la metodología QSAR. Desarrollo de la tecnología COMFA. Determinación del farmacóforo. Diseño de fármacos asistido por ordenador. Modelado molecular y técnicas de binding y docking. Estudios de la metodología avanzada y no convencional en la síntesis de fármacos. Metodologías actuales en la síntesis de fármacos heterocíclicos. Productos naturales como fuentes de nuevos fármacos. Química combinatoria, síntesis paralelas y cribado de alto rendimiento (HTS). Bioinformática, genómica y proteómica. Ejemplos prácticos de diseño: Agonistas 5-HT_{1D}; desarrollo de los IECAs, fármacos antisida y antitumorales, desarrollo de antiinflamatorios esteroideos y no esteroideos, inhibidores selectivos de COX-2, nuevas dianas en neuroprotección, uso de bases de datos para revisiones bibliográficas.

COMPETENCIAS GENERALES Y ESPECÍFICAS DEL MÓDULO

BÁSICAS Y GENERALES

- 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 el 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 la habilidad de aprendizaje que les permita continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.
- CG0.** Hablar bien en público.
- CG1.** Capacitar a los alumnos a abordar problemas de forma científica, desde una perspectiva multidisciplinar, formulando hipótesis y objetivos para su resolución, extrayendo conclusiones fundadas que sean de aplicación en las ciencias farmacéuticas, biomédicas, tecnológicas y de la práctica farmacéutica, con especial énfasis en la investigación, desarrollo, control e innovación de productos farmacéuticos.
- CG2.** Realizar investigación en cualquier entorno del sector farmacéutico y de la salud.
- CG3.** Aprender las técnicas de diseño y desarrollo de nuevos fármacos y/o medicamentos innovadores.
- CG4.** Saber aplicar las técnicas de investigación, tanto metodológicas como tecnológicas, en distintas áreas de estudio y enseñar a redactar correctamente un trabajo científico, informe o protocolo, empleados asiduamente en la investigación de productos sanitarios.
- CG5.** Saber plantear un diseño experimental, comprender y resolver el análisis de los datos experimentales mediante programas computacionales e interpretar los resultados.
- CG6.** Utilizar eficazmente los recursos informáticos para la documentación, búsqueda de datos, confección y presentación de trabajos de investigación en los campos de las ciencias farmacéuticas.
- CG7.** Conocer los sistemas de gestión de la calidad que se pueden aplicar con relación a los ensayos de laboratorio para el control de calidad de los fármacos, así como en el desarrollo de actividades de prevención frente a los riesgos debidos a usos de agentes químicos en el laboratorio.



CG8. Realizar trabajos bibliográficos sobre distintas patologías y los correspondientes prototipos terapéuticos.

CG12. Conocer y profundizar en las técnicas de diseño racional de fármacos.

CG17. Trabajar en equipos multidisciplinares tanto a nivel de la industria farmacéutica como de organizaciones sanitarias.

CG18. Ser capaces de presentar públicamente ideas, procedimientos o informes de investigación, comunicando sus conclusiones y promoviendo el uso racional del medicamento.

ESPECIFICAS

CE3. Utilizar eficazmente los recursos informáticos para la documentación, búsqueda de datos, confección y presentación de trabajos de investigación en los campos de las ciencias farmacéuticas.

CE5. Saber cómo confeccionar y presentar comunicaciones científicas.

OBJETIVOS (EXPRESADOS COMO RESULTADOS ESPERABLES DE LA ENSEÑANZA)

El alumno sabrá/comprenderá:

1. Conocer los métodos de búsqueda y descubrimiento de nuevos fármacos.
2. Conocer cómo se determina un farmacóforo.
3. Conocer cómo se pueden modificar las propiedades de un fármaco.
4. Conocer el concepto y utilidad de las relaciones estructura-actividad (SAR).
5. Conocer el establecimiento de las relaciones QSAR
6. Conocer el uso de los ordenadores en el diseño de nuevos fármacos

El alumno será capaz de:

1. Realizar búsquedas bibliográficas relacionadas con el diseño de nuevos fármacos.
2. Aprender a establecer las relaciones SAR y QSAR en diversos fármacos.
3. Adquirir habilidades en el uso de programas de modelado molecular.
4. Utilizar las técnicas de docking molecular para analizar las interacciones entre un fármaco y su diana terapéutica.
5. Utilizar programas de modelado para la realización de screening virtual en el desarrollo de nuevos fármacos.

TEMARIO DETALLADO DE LA ASIGNATURA

1. Introducción al software Schrödinger que se utilizará en el sistema de prácticas
2. Construcción de modelos tridimensionales de moléculas orgánicas, optimización geométrica y minimización energética de las mismas mediante campos de fuerza de mecánica molecular. Evaluación de las propiedades de dichas moléculas.
3. Manejo de la base de datos Brookhaven DataBank, para la obtención de las estructuras tridimensionales de diversas dianas terapéuticas. Análisis y optimización de las mismas.
4. Estrategias de búsquedas conformacionales en los diversos ligandos. Generación de un farmacóforo y cribado virtual de bases de datos a partir del mismo.
5. Determinación de relaciones QSAR y su uso en el diseño de nuevos fármacos



6. Estudios de docking molecular para el cribado de nuevos fármacos.
7. Uso de la dinámica molecular en el estudio de las interacciones fármaco-receptor.

BIBLIOGRAFÍA

- C. Avendaño. **Introducción a la Química Farmacéutica**. (2ª Ed.). Ed. Interamericana-McGraw-Hill. Madrid 2001.
- **Foye's Principles of Medicinal Chemistry**. Ed. Ed. Thomas L. Lemke... (7th Ed. Philadelphia. 2013).
- A. Delgado. **Introducción a la Química Terapéutica**. Ed. Díaz de Santos. (2ª Ed.) Barcelona 2003.
- G. L. Patrick. **An Introduction to Medicinal Chemistry**. (5ª Ed) Ed. Oxford University Press. 2013.
- H. Kubinyi. **3D Qsar in Drug Design: Recent Advances**. Ed. Springer, 1998.
- W. Jahnke, D. A. Erlanson. **Fragment-based Approaches in Drug Discovery**. Vol 34. Ed. Wiley-WCH. 2008

ENLACES RECOMENDADOS

Protein DataBank: <http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>
Reaxys: http://biblioteca.ugr.es/pages/biblioteca_electronica/bases_datos/reaxys
IUPAC Nomenclature of Organic Chemistry:
http://www.chem.uiuc.edu/GenChemReferences/nomenclature_rules.html
Journal of European Medicinal Chemistry:
<http://www.sciencedirect.com/science/journal/02235234?sdc=1>
Journal of Medicinal Chemistry: <http://pubs.acs.org/journal/jmcmr>

METODOLOGÍA DOCENTE

- Clases magistrales o lecciones teóricas.
- Realización y exposición de trabajos encargados por el profesor.
- Tutorías.
- Trabajo autónomo del estudiante.

EVALUACIÓN (INSTRUMENTOS DE EVALUACIÓN, CRITERIOS DE EVALUACIÓN Y PORCENTAJE SOBRE LA CALIFICACIÓN FINAL, ETC.)

SE2. Tareas especializadas tales como ensayos, informes y diarios de clases, notas de prensa, evaluaciones críticas, resúmenes ejecutivos, informes (30,0 %).
SE3. Exposiciones orales, individuales o en grupos, de trabajos sobre contenidos de la materia (seminario) y sobre ejecución de tareas prácticas correspondientes a competencias concretas (40,0 %).
SE4. Observación por los profesores y tutores de las conductas que realiza el alumno en la ejecución de las competencias, así como el grado de participación (30 %).

INFORMACIÓN ADICIONAL





UNIVERSIDAD
DE GRANADA