

MASTER^{OO}

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA ORGÁNICA



GUÍA DOCENTE

Química médica

Medicinal Chemistry



Asignatura: Química Médica
Código: 3251
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Orgánica
Nivel: Máster
Tipo: Optativa
Nº de créditos: 3 ECTS

1. ASIGNATURA / COURSE TITLE

Química Médica / [Medicinal Chemistry](#)

1.1. Código / Course number

32541

1.2. Materia / Content area

Química Médica / [Medicinal Chemistry](#)

1.3. Tipo / Course type

Formación optativa / [Elective subject](#)

1.4. Nivel / Course level

Máster / [Master](#)

1.5. Curso / Year

Primero / [First](#)

1.6. Semestre / Semester

Primero / [First](#)

1.7. Número de créditos / Credit allotment

3 ECTS / [3 ECTS credits](#)

1.8. Requisitos previos / Prerequisites

Licenciatura o Grado en Química, Bioquímica o Farmacia, preferiblemente con conocimientos de Química Orgánica Avanzada.

Es recomendable que los alumnos dispongan de un nivel de inglés que les permita leer la bibliografía de consulta.

[Grade in Chemistry](#) or related areas is considered necessary, preferably with knowledge of [Advanced Organic Chemistry](#).



Asignatura: Química Médica
Código: 3251
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Orgánica
Nivel: Máster
Tipo: Optativa
Nº de créditos: 3 ECTS

A good level of English is recommended to properly understand the suggested bibliography.

1.9. Requisitos mínimos de asistencia a las sesiones presenciales / **Minimum attendance requirement**

La asistencia a las clases de teoría y seminarios es fundamental/ **Attendance to the theoretical courses and seminars is essential.**

La asistencia a las tutorías es recomendable / **Attendance to tutorials is recommended.**

1.10. Datos del equipo docente / **Faculty data**

Coordinador / **Coordinator:** Dr. Belén Cid de La Plata
Departamento de / **Department of:** Química Orgánica
Despacho - Módulo / **Office - Module:** C-1-401
Teléfono / **Phone:** +91497-5505
Correo electrónico/**Email:** belen.cid@uam.es

Docente(s) / **Lecturer(s):** Dr. Francisco Sánchez Sancho
Departamento de / **Department of:** Instituto de Química Médica
CSIC / **CSIC**
Despacho - Módulo / **Office - Module:** 347
Teléfono / **Phone:** +34 915622900 ext 408
Correo electrónico/**Email:** francisco.sanchez@csic.es
Página web/**Website:** www.iqm.csic.es
Horario de atención al alumnado/**Office hours:** de acuerdo con los estudiantes / **By appointment.**

Docente(s) / **Lecturer(s):** Dr. María Jesús Pérez de Vega
Departamento de / **Department of:** Instituto de Química Médica
CSIC / **CSIC**
Despacho - Módulo / **Office - Module:** 315
Teléfono / **Phone:** +34 912587540
Correo electrónico/**Email:** pdevega@iqm.csic.es
Página web/**Website:** http://www.iqm.csic.es/
Horario de atención al alumnado/**Office hours:** de acuerdo con los estudiantes / **By appointment.**

Docente(s) / **Lecturer(s):** Dr. Mercedes Martín Martínez
Departamento de / **Department of:** Instituto de Química Médica
CSIC / **CSIC**
Despacho - Módulo / **Office - Module:** 105bis



Asignatura: Química Médica
Código: 3251
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Orgánica
Nivel: Máster
Tipo: Optativa
Nº de créditos: 3 ECTS

Teléfono / **Phone**: +34 912587478

Correo electrónico/**Email**: mercedes@iqm.csic.es

Página web/**Website**: <http://www.iqm.csic.es>

Horario de atención al alumnado/**Office hours**: de acuerdo con los estudiantes / **By appointment**.

1.11. Objetivos del curso / **Course objectives**

- Conocer y entender los conceptos básicos en química médica.
- Familiarizarse con las diferentes estrategias que se utilizan actualmente o se han utilizado para el diseño de fármacos.
- Adquirir conocimientos de las distintas herramientas que se emplean en la optimización de prototipos.
- Que los estudiantes sean capaces de entender e interpretar adecuadamente proyectos de química médica.
- Que los estudiantes adquieran la capacidad de manejar de forma integrada los diferentes conceptos y aspectos de la química médica.

At the conclusion of this course, the students should be able to:

- **Know the basic concepts in medicinal chemistry.**
- **Understand the alternative strategies in drug development.**
- **Identify the different tools that are used in the process of hit optimization.**
- **Understand and properly interpret medicinal chemistry projects.**
- **Use in an integrated way the different concepts and aspects of medicinal chemistry.**

1.12. Contenidos del programa / **Course contents**

1. La Química Médica y el desarrollo de fármacos. Aspectos Generales.
2. Bases moleculares de la acción de fármacos. Dianas Terapéuticas. Conceptos fundamentales.
3. Estrategias para el descubrimiento de Fármacos I. Diseño basado en el ligando.



Asignatura: Química Médica
Código: 3251
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Orgánica
Nivel: Máster
Tipo: Optativa
Nº de créditos: 3 ECTS

4. Estrategias para el descubrimiento de Fármacos II. Diseño basado en la estructura de la diana biológica.
 5. Aplicaciones de las nuevas tecnologías a la Química Médica. EM, RX, RMN, SPR.
 6. Optimización de prototipos (bioisosterismo, propiedades farmacocinéticas – ADME/Tox).
1. Medicinal chemistry and pharmaceutical development. General aspects.
 2. Molecular basis of drug action. Biological Targets. General concepts.
 3. Strategies for Drug Discovery I. Design based on the ligand.
 4. Strategies for Drug Discovery II. Design based on the structure of the biological target.
 5. Application of new technologies to Medicinal Chemistry. EM, RX, NMR, SPR.
 6. Optimization of prototypes (bioisosterism, pharmacokinetics - ADME / Tox).

1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

- *Medicinal Chemistry. An Introduction.* Gareth Thomas. 2nd ed. Chichester : John Wiley, 2007.
- *Burger's Medicinal Chemistry, Drug Discovery and Development.* 7th ed. Donald J. Abraham & David P. Rotella, Vol.1, Wiley, 2010.
- *The Practice of Medicinal Chemistry* Camille G. Wermuth. 3rd edition. Elsevier, 2008.
- *Goodman and Gilman's The Pharmacological Basis of Therapeutics.* Laurence Brunton, Bruce Chabner, Bjorn Knollman, Eds. McGraw-Hill, 12th edition, 2011.
- *Lehninger, Principles of Biochemistry*_ 6th ed. D.L. Nelson, M.M. Cox, Eds. W.H. Freeman and Company, New York, 2012.
- *Lead Generation Approaches in Drug Discovery*, Edited by Zoran Rankovic, Richard Morphy, Hoboken, New Jersey: Wiley-Interscience, 2010
- *The Evolution of Drug Discovery: From Traditional Medicines to Modern Drugs.* Edited by Enrique Raviña, Hugo Kubinyi, Wiley-VCH, 2011



Asignatura: Química Médica
Código: 3251
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Orgánica
Nivel: Máster
Tipo: Optativa
Nº de créditos: 3 ECTS

- *Medicinal Natural Products: A Biosynthetic Approach*, 3rd Edition, P.M. Dewick, John Wiley and Sons, 2009.
- *Molecules and Medicine* E. J. Corey, B. Czako, L. Kürti., John Wiley & Sons, Inc.: Hoboken, NJ, 2007.
- *Drug-like Properties: Concepts, Structure Design and Methods: from ADME to Toxicity Optimization*. E. Kerns and L. Di, Elsevier, 2008.
- *Computational medicinal chemistry for drug discovery*. Edited by Patrick Bultinck et al. New York : Marcel Dekker, 2004.
- *Drug bioavailability: estimation of solubility, permeability, absorption and bioavailability*. Edited by Han van de Waterbeemd, Hans Lennernäs and Per Artursson. Wienheim : Wiley-VCH, 2003.
- *Drug metabolism in drug design and development: basic concept and practice*. Edited by Donglu Zhang, Mings Zhu, W. Griffith Humphreys. Hoboken, New Jersey: Wiley-Interscience, 2008.
- *Fragment based drug discovery: A practical approach*. E. R. Zartler, and M. J. Shapiro. John Wiley and Sons, 2008.

2. Métodos docentes / Teaching methodology

- Clases teóricas. Exposición oral de los contenidos teóricos de la asignatura. Se utilizará material audiovisual para una mayor claridad en la exposición de los contenidos.
- Seminarios. Se realizarán sesiones donde a través de la resolución de problemas u otras tareas encomendadas a los estudiantes, se profundice en el entendimiento de la materia impartida en las clases teóricas.
- Tutorías programadas. Sesiones en grupos pequeños o individuales donde se debatan aquellos aspectos que puedan resultar de más difícil comprensión para los estudiantes.
- Aprendizaje basado en problemas. Se propondrán diferentes ejercicios para facilitar la profundización y entendimiento de los contenidos teóricos impartidos.
- Estudio personal. Aprendizaje autónomo dirigido por el profesor.
- Theoretical lessons. Oral presentations about the theoretical contents of the subject. Audiovisual material will be used for clarity sake in the presentation of the contents.
- Seminars. Sessions where a deeper understanding of the subject will be acquired through problem solving or other tasks assigned to students



Asignatura: Química Médica
Código: 3251
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Orgánica
Nivel: Máster
Tipo: Optativa
Nº de créditos: 3 ECTS

- Tutorial session. Small group or individual sessions to discuss and comment issues which could be more difficult to understand for the students.
- Problem-based learning. Different exercises will be proposed to facilitate the proper understanding of the theoretical content.
- Personal study. Self- learning supervised by the teacher.

3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

		Nº de horas/ Nº of hours	Porcentaje/ Percentage
Presencial/ Contact classes	Clases teóricas/ Theory lessons	18 h	33 %
	Tutorías/ Tutorials	1 h	
	Seminarios /Seminars	4 h	
	Realización del examen final/ Final test	2 h	
No presencial/ Independent study time	Estudio semanal, elaboración ejercicios y trabajos propuestos Weekly study, preparation of exercises and proposed works	30 h	67 %
	Preparación del examen/ Test preparation	20 h	
Carga total de horas de trabajo/Total charge of working hours: 25 h. x 3 ECTS		75 h	100%

4. Métodos de evaluación y porcentaje en la calificación final / Evaluation procedures and weight of components in the final grade

Convocatoria ordinaria:

- Examen final. Para superar el curso es necesario aprobar el examen final. Este examen constituirá un 60 % de la nota.
- Participación, trabajos, problemas propuestos... Estas tareas constituirán el 40 %.



Asignatura: Química Médica
Código: 3251
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Orgánica
Nivel: Máster
Tipo: Optativa
Nº de créditos: 3 ECTS

Convocatoria extraordinaria:

- Se realizará un nuevo examen. Para la calificación se tendrá en cuenta también las tareas realizadas en el curso, y se permitirá la entrega de aquellas tareas que no se presentaron.

Ordinary call:

- Final exam. To pass the course, students must pass the final exam. This exam will provide 60% of the final mark.
- Participation, homework, problems sheets... These tasks will constitute 40% of the final mark.

Extraordinary call:

- There will be an extra call to do a *new* final exam. For the final grade, the work done during the course will be taken into account. It will be permitted the delivery of those tasks that were not presented during the course.

	Conv. ordinaria / Ordinary call	Conv. extraordinaria / Extraordinary call
Examen final / Final exam	60%	60%
Seminarios, elaboración de ejercicios y trabajos propuestos Seminars, preparation of exercises and proposed works	35%	35%
Participación de los estudiantes / Participation of the students	5%	5%

5. Cronograma* / Course calendar

Semana	Contenido	Horas presenciales	Horas no presenciales^a
1	La Química Médica y el desarrollo de fármacos. Bases moleculares de la acción de fármacos.	6 h	30h
1-2	Estrategias para el descubrimiento de fármacos I y II	6 h	



Asignatura: Química Médica
Código: 3251
Centro: Facultad de Ciencias
Titulación: Máster en Química Orgánica
Nivel: Máster
Tipo: Optativa
Nº de créditos: 3 ECTS

Semana	Contenido	Horas presenciales	Horas no presenciales ^a
2-3	Nuevas tecnologías en Química Médica. Optimización de prototipos	6 h	20 h
4	Seminarios	4h	
5	Examen	2h	

* Este cronograma tiene carácter orientativo.

^a El trabajo de las horas no presenciales lo constituirá la resolución de cuestionarios, problemas o trabajos planteados por el profesor. Así mismo incluye el estudio de la teoría impartida en las sesiones presenciales.

Week	Contents	Contact hours	Independent study time ^a
1	The medicinal chemistry and drug development. Molecular basis of drug action.	6 h	30h
1-2	Strategies for Drug Discovery I and II	6 h	
2-3	New Technologies in Medicinal Chemistry Optimization of prototypes	6 h	
4	Seminars	4h	
5	Final exam	2h	20 h

*This schedule is merely indicative.

^a Independent study time will be related to satisfactorily solved problem sessions, practical workshops or any tasks proposed by the teaching staff related to the subject of the lectures. Moreover, personal study of theoretical material issued in the course is also included in this topic.