



Máster Universitario en Química Orgánica

QUÍMICA ORGÁNICA BIOLÓGICA

Guía Docente

Curso académico 2014-15

1. Datos descriptivos de la materia.

Carácter: Optativa

Convocatoria: 1^{er} cuatrimestre

Créditos: 3 ECTS

Profesorado:

José Luis Mascareñas Cid

Catedrático de Química Orgánica,
Departamento de Química Orgánica y
Centro Singular de Investigación en Química
Biológica y Materiales Moleculares (CIQUS)
Clases expositivas y Grupos de seminario

Juan Carlos Estévez Cabanas

Profesor Titular de Química Orgánica,
Departamento de Química Orgánica y
Centro Singular de Investigación en Química
Biológica y Materiales Moleculares (CIQUS)
Clases expositivas y Grupos de seminario

M. Eugenio Vázquez Sentís

Profesor Titular de Química Orgánica,
Departamento de Química Orgánica y
Centro Singular de Investigación en Química
Biológica y Materiales Moleculares (CIQUS)
Clases expositivas y Grupos de seminario

Idioma en que es impartida: Castellano e inglés

2. Situación, significado e importancia de la materia en el ámbito de la titulación.

2.1. Módulo al que pertenece la materia en el Plan de Estudios. Materias con las que se relaciona.

M2- Especialización. Se relaciona específicamente con otras materias optativas modulo 2 orientadas hacia una formación especializada en Química Biológica (Química Médica, Química Supramolecular, etc.).

2.2. Papel que juega este curso en ese bloque formativo y en el conjunto del Plan de Estudios.

En esta materia se pretende que el alumno adquiera unos conocimientos avanzados sobre la estructura, función y aplicaciones de las principales biomoléculas, fundamentalmente proteínas, carbohidratos y ácidos nucleicos. Se parte de la idea que los estudiantes disponen de conocimientos de química para entender diversos aspectos sobre el comportamiento molecular de biomoléculas de distinto tipo. No solo se estudiarán aspectos estructurales y funciones biológicas de las diferentes biomoléculas, sino que se abordará el estudio de las diversas estrategias existentes para su manipulación sintética, así como y las técnicas empleadas para modular y/o modificar su actividad biológica con el fin de conseguir nuevas herramientas en la investigación biomédica.

2.3. Conocimientos previos (recomendados/obligatorios) que los estudiantes han de poseer para cursar la asignatura.

Se recomienda tener conocimiento sobre el manejo de bases de datos (Cambridge X-Ray data bank, protein data bank, etc.), así como de programas de visualización de macromoléculas.

3. Objetivos del aprendizaje y competencias a alcanzar por el estudiante con la asignatura.

3.1. Objetivos del aprendizaje.

- Conocer el papel fundamental que los metabolitos primarios y secundarios desempeñan en los organismos vivos.
- Conocer su utilidad en la síntesis y elaboración de compuestos biológicamente activos.
- Adquirir conocimientos sobre las técnicas instrumentales para el aislamiento y la determinación estructural de las sustancias naturales.
- Conocimiento de las características de estructura y reactividad de los compuestos heterocíclicos.

3.2. Competencias básicas y generales.

- Acceder a la información necesaria (bases de datos, artículos científicos, etc.) y tener suficiente criterio para su interpretación y empleo.
- Estar bien adaptados para seguir futuros estudios de doctorado en áreas multidisciplinares.
- Presentar públicamente los resultados de una investigación o un informe técnico.
- Capacidad para aplicar el método científico y los principios de la Química Orgánica para formular y resolver problemas complejos.

3.3. Competencias específicas.

- Conocer los métodos de síntesis orgánica más relevantes, incluyendo los fundamentos de los procesos estereoselectivos en química orgánica, y ser capaz de diseñar rutas de síntesis de moléculas orgánicas complejas.
- Conocer y comprender los mecanismos de reacción comúnmente aceptados en Química Orgánica y los métodos disponibles para su determinación.
- Conocer las aplicaciones biológicas y médicas de los compuestos orgánicos.
- Conocer la síntesis y reactividad de compuestos heterocíclicos, así como sus aplicaciones en química supramolecular y su papel como componentes de productos naturales y fármacos.
- Conocer los tipos estructurales de productos naturales, así como las rutas biosintéticas generales de los metabolitos secundarios y sus mecanismos de formación.

3.4. Competencias transversales.

- Manejar las herramientas informáticas y las tecnologías de la información y la comunicación, así como el acceso a bases de datos en línea.
- Desarrollar la capacidad de comunicación científico-técnica en castellano y en inglés, tanto de forma oral como escrita, utilizando los medios audiovisuales más habituales.
- Aplicar los conceptos, principios, teorías o modelos relacionados con la Química Orgánica a entornos nuevos o poco conocidos, dentro de contextos multidisciplinares.
- Demostrar capacidad de aprendizaje y trabajo autónomo para el desarrollo de su vida profesional.

• 4. Contenidos del curso.

4.1. Epígrafes del curso:

Contenidos teóricos:

Tema 1. Introducción y aspectos históricos. Estructura y funciones básicas de la célula. Biomoléculas más importantes.

Tema 2. Péptidos y proteínas: aspectos estructurales. Síntesis y modificación. Diseño de proteínas funcionales. Metaloproteínas : tipos, métodos de estudio, ejemplos y aplicaciones

Tema 3. Ácidos nucleicos: aspectos estructurales. Técnicas de síntesis y análisis. Interacciones con otros ácidos nucleicos. Interacciones con moléculas pequeñas. Interacciones con metales. Interacciones con proteínas y péptidos.

Tema 4. Carbohidratos y sus derivados: aspectos estructurales y síntesis. Glicoconjugados y su papel en la comunicación celular. Glicocódigo. Glicoterapia.

Tema 5. Bioconjugación. Conceptos básicos. Metodología clásica de bioconjugación. Reacciones ortogonales y química click.

4.2. Bibliografía recomendada

- 1.- Molecular Biology of the Cell, B. Alberts et all, Garland Science, 2002
- 2.- Introduction to Bioorganic Chemistry and Chemical Biology. Vranken, D-V; Weiss, G.A. Garland Science 2012
- 3.- Nucleic Acids in Chemistry and Biology. Blackburn, M.: Gait, M.J.; Loakes, D.; Williams, D.M. (Editors). Royal Society of Chemistry, 2006
- 4.- Peptides: Synthesis, Structures and Application. Gutte, B. Academic Press,.1995
- 5.- Introduction to Protein Structure. Brändén, C-I; Tooze, J. Garland Science 1999.
- 6.- Glycochemistry, Principles, Synthesis and Applications. Ed. Peng G. Wang, C. R. Betozzi. Marcel Dekker, New York, 2001.
- 7.- Concepts and Models in Bioinorganic Chemistry. Karls, R
- 8.- Metal Complex-DNA Interactions. Hadjiliadis, N.; Sletten, E. (Editors), Wiley, 2009.
- 9.- The Molecular and Supramolecular Chemistry of Carbohydrates. A chemical introduction to glicoscience. D. Serge. Oxford Science publications, 1997
- 10.- Introduction to Glycobiology. Taylor, M.E.; Drickamer, K. Oxford University press. 2011
- 11.- Carbohydrate Chemistry. Davies, B.G.; Fairbanks. A.J. Oxford Science publications, 2004
- 12.- Glycoscience, Synthesis of Substrate Analogs and Mimetics. Driguez, H; Thiem, J. Springer-Verlag, New York, 1997.
- 13.- Bioinorganic chemistry, inorganic elements in the chemistry of life: an introduction and guide. Kaim, W. Schwederski, B., Klein, A. 2º ed. John Wiley, Chichester , 2013
- Crichton, R.R.. Biological Inorganic Chemistry. An Introduction. Elsevier, Amsterdam, 2008

TEMA 1. Introducción y aspectos históricos. Estructura y funciones básicas de la célula. Biomoléculas más importantes.

1. Sentido del tema (Introducción)

Se trata de situar al estudiante en el campo tratando de relacionar la estructura y función de las células con los diferentes componentes moleculares que la forman.

2. Epígrafes del tema.

Estructura y ORGANIZACION BIOQUIMICA de las células

DIFERENTES tipos de biomoleculas, estructura básica y funciones

3. Bibliografía

Molecular Biology of the Cell, B. Alberts et all, Garland Science, 2002

3. Actividades a desarrollar.

Discusión en equipo sobre las bases moleculares de la célula.

TEMA 2. Péptidos y proteínas: aspectos estructurales. Síntesis y modificación. Diseño de proteínas funcionales. Metaloproteínas: tipos, métodos de estudio, ejemplos y aplicaciones

1. Sentido del tema (Introducción)

Se trata de dar a conocer al estudiante los aspectos más importantes de la estructura y función de las proteínas y de describir como se pueden sintetizar y modificar usando métodos químicos o biológicos.

2. Epígrafes del tema.

Amino ácidos y péptidos

Proteínas y funciones

Estructura primaria, secundaria, terciaria y cuaternaria

Biosíntesis

Síntesis mediante métodos químicos

Modificación mediante métodos químicos

Metaloproteínas y modelos sintéticos.

Aplicaciones

3. Bibliografía

1.- Peptides: Synthesis, Structures and Application. Gutte, B. Academic Press,.1995

2.- Introduction to Protein Structure. Brändén, C-I; Tooze, J. Garland Science 1999.

3. Concepts and Models in Bioinorganic Chemistry. Kraatz, H.-B.; Metzler-Nolte, N. (Editors),

Wiley-VCH, Weinheim, 2006

4.- Actividades a desarrollar.

Ejercicios sobre métodos de construcción de proteínas usando técnicas sintéticas de laboratorio.

Discusión en grupo de artículos de investigación relacionados con los epígrafes.

TEMA 3. Ácidos nucleicos: aspectos estructurales. Técnicas de síntesis y análisis. Interacciones con otros ácidos nucleicos. Interacciones con moléculas pequeñas y metales. Interacciones con proteínas y péptidos.

1. Sentido del tema (Introducción)

Se trata de dar a conocer al estudiante los aspectos más importantes de la estructura y función de los diferentes ácidos nucleicos, y de cómo se pueden preparar y manipular mediante métodos químicos y biológicos.

2. Epígrafes del tema.

Estructura de los nucleótidos

Estructura y función de los diferentes ácidos nucleicos

Química supramolecular de ácidos nucleicos

Biosíntesis

Síntesis y manipulación de ácidos nucleicos mediante métodos químicos

Interacción con moléculas pequeñas y complejos metálicos

3. Bibliografía

1.- Nucleic Acids in Chemistry and Biology. Blackburn, M.; Gait, M.J.; Loakes, D.; Williams, D.M. (Editors). Royal Society of Chemistry, 2006

2.- Metal Complex-DNA Interactions. Hadjiladis, N.; Sletten, E. (Editors), Wiley, 2009.

2. Actividades a desarrollar.

Presentación de trabajos relacionados para discutir en grupo.

Discusión en grupo de artículos de investigación relacionados con los epígrafes.

TEMA 4. Carbohidratos y sus derivados: aspectos estructurales y síntesis

1. Sentido del tema (Introducción)

Se iniciará con una breve introducción sobre los monosacáridos. Se describirán a continuación los oligosacáridos y polisacáridos, estudiando con detalle su nomenclatura, estructura, métodos de determinación estructural, métodos de síntesis química, síntesis biológica y sus principales aplicaciones.

También se estudiarán los derivados de los monosacáridos de tamaño pequeño: glicósidos e inhibidores de glicosidasas; incidencia, síntesis y aplicaciones.

Por último se atenderá a los glicoconjugados: glicolípidos y glicoproteínas. El concepto y conocimiento actual del glicocódigo. Las aplicaciones de los glicoconjugados en la terapia médica.

2. Epígrafes del tema.

Los monosacáridos, nomenclatura, estructura y química.

Los oligosacáridos y polisacáridos, nomenclatura, estructura.

Determinación estructural de oligo- y polisacáridos.

Biosíntesis, síntesis química y síntesis biológica de oligosacáridos.

Los glicósidos y los inhibidores de glicosidasas: tipos, incidencia en la naturaleza, métodos de síntesis y aplicaciones biológicas.

Los glicolípidos. Tipos de estructuras. Incidencia natural. Biosíntesis. Funciones.

Las glicoproteínas. Tipos de estructuras. Incidencia natural. Biosíntesis. Funciones.

El glicocódigo. El concepto de Glicocódigo. Estado actual del conocimiento del Glicocódigo, perspectivas futuras y alcance de las mismas.

Glicoterapia. Funciones conocidas de los glicoconjugados. Uso de glicoconjugados en terapia, estado actual y perspectivas.

3. Bibliografía

- 1.- Glycochemistry, Principles, Synthesis and Applications. Ed. Peng G. Wang, C. R. Betozzi. Marcel Dekker, New York, 2001
- 2.- Introduction to Glycobiology. Taylor, M.E.; Drickamer, K. Oxford University press. 2011

4.2.2. Complementaria.

- 1.- Glycochemistry, Principles, Synthesis and Applications. Ed. Peng G. Wang, C. R. Betozzi. Marcel Dekker, New York, 2001
- 2.- Glycoscience, Synthesis of Substrate Analogs and Mimetics. Driguez, H; Thiem, J. Springer-Verlag, New York, 1997
- 3.- The Molecular and Supramolecular Chemistry of Carbohydrates. A chemical introduction to glycoscience. D. Serge. Oxford Science publications, 1997

4. Actividades a desarrollar.

Resolver los ejercicios relacionados con este tema indicados por el profesor y entregarlos en la fecha indicada en el *calendario de actividades de la materia* (el alumno debe guardar una copia del trabajo entregado). En el seminario correspondiente a este tema, los alumnos resolverán estos ejercicios en la pizarra.

Aquellos alumnos que tengan especial dificultad con los ejercicios que se realizan en este tema deberán contactar en el horario de tutorías con el profesor para recibir el apoyo necesario.

TEMA 5. Bioconjugación. Conceptos básicos. Metodología clásica de bioconjugación. Reacciones ortogonales y química click.

1. Sentido del tema (Introducción)

Se hará una introducción a las técnicas de modificación de biomoléculas para investigación, diagnóstico y aplicaciones terapéuticas, con especial énfasis en los conceptos químicos y aplicaciones prácticas de las biomoléculas conjugadas.

2. Epígrafes del tema.

Introducción: Bioconjugación

La química de los grupos reactivos en las biomoléculas

Agentes de entrecruzamiento: agentes homobifuncionales y heterobifuncionales

Marcadores fluorescentes

Nanopartículas y especies nanométricas del C (fulerenos, nanotubos, grafenos)

Aplicaciones.

3. Bibliografía

Bioconjugate Techniques, Greg T. Hermanson, Academic Press, 2nd ed. 2008

Chemical Biology From Small Molecules to Systems Biology and Drug Design, S. L. Schreiber, T. M. Kapoor, G. Wess, Wiley-VCH, 2007.

4. Actividades a desarrollar.

Lectura de artículos científicos y presentaciones.

5. - Indicaciones metodológicas y atribución de carga ECTS.

5.1. Atribución de créditos ECTS.

TRABAJO PRESENCIAL EN EL AULA	HORAS	TRABAJO PERSONAL DEL ALUMNO	HORAS
Clases expositivas en grupo grande	14	Estudio autónomo individual o en grupo	15
Clases interactivas en grupo reducido (Seminarios)	5	Resolución de ejercicios, u otros trabajos propuestos	31
Tutorías en grupo muy reducido	3	Elaboración de ejercicios propuestos.	5
Total horas trabajo presencial en el aula o en el laboratorio	24	Total horas trabajo personal del alumno	51

5.2. Actividades formativas en el aula con presencia del professor

A) *Clases expositivas en grupo grande* ("L" en las *tablas horarias*): Se propone llevar a cabo 12 sesiones de clases magistrales en grupo único donde se desarrollarán los contenidos teóricos de la materia acompañados de los correspondientes ejemplos ilustrativos. Consistirá mayoritariamente en presentaciones de Power Point. Los alumnos tendrán, con suficiente antelación, las copias de las correspondientes presentaciones a través del aula virtual, con el fin de que el alumno pueda preparar previamente la materia que se va a impartir además de facilitar el seguimiento de las explicaciones. Se fomentará en todo momento la participación interactiva del alumno. La asistencia a estas clases no es obligatoria, pero resulta muy recomendable.

B) *Clases interactivas en grupo reducido (Seminarios)*, "S" en las *tablas horarias*): Se propone llevar a cabo 7 sesiones de seminarios de problemas de grupo reducido donde los alumnos resolverán los problemas o ejercicios planteados por el profesor. Se utilizarán también para resolver las dudas que vayan surgiendo al impartir el temario. La asistencia a estas clases es obligatoria.

D) *Tutorías de pizarra en grupo muy reducido* ("T" en las *tablas horarias*): Tutorías programadas por el profesor y coordinadas por el Centro. En general, supondrán para cada alumno 2 horas por cuatrimestre y asignatura. Se proponen actividades como la supervisión de trabajos dirigidos, aclaración de dudas sobre teoría, problemas, ejercicios, lecturas u otras tareas propuestas; así como la presentación, exposición, debate o comentario de trabajos individuales o realizados en pequeños grupos. En muchos casos el profesor exigirá a los alumnos la entrega de ejercicios previa a la celebración de la tutoría. Estas entregas vendrán recogidas en el calendario de actividades que van a realizar los alumnos a lo largo del curso en la *Guía Docente* de la asignatura correspondiente. La asistencia a estas clases es obligatoria.

5.3. Recomendaciones para el estudio de la materia

- Es muy importante asistir a las clases expositivas.
- Es fundamental mantener el estudio de la materia "al día".
- Una vez finalizada la lectura de un tema en el manual de referencia, es útil hacer un resumen de los puntos importantes (ver resumen de conceptos importantes en el Manual de referencia).

- La resolución de ejercicios es clave para el aprendizaje de esta materia. Puede resultar de ayuda empezar por los problemas resueltos en los manuales de apoyo y de referencia, para seguir después con los problemas propuestos al final de cada capítulo en el Manual de referencia.

5.4. Calendario de actividades

Noviembre 2014	Lunes	Martes	Miércoles	Jueves	Viernes
16-18 h	3	4	5	6	7
16-18 h	10	11	12	13	14
16-18 h	17	18	19	20	21
10-12 h	24	25	26	27	28

	Lectures
	Seminars
	Tutorials
	Holidays

6. Indicaciones sobre la evaluación.

6.1. Procedimiento de evaluación.

6.1. Procedimiento de evaluación.

La evaluación de esta materia se hará mediante evaluación continua y la realización de un examen final, estando condicionado el acceso al examen a la participación en al menos el 80% de las actividades docentes presenciales de asistencia obligatoria (seminarios y tutorías).

La evaluación continua (N1) tendrá un peso del 40% en la calificación de la asignatura y constará de dos componentes: clases interactivas en grupo reducido (seminarios) y clases interactivas en grupo muy reducido (tutorías). Los seminarios y las tutorías incluirán los elementos siguientes: resolución de problemas y casos prácticos (15%), realización de trabajos e informes escritos (10%), exposición oral de [trabajos, informes, problemas y casos prácticos], 10%] y preguntas y cuestiones orales durante el curso (5%).

El examen final (N2) versará sobre la totalidad de los contenidos de la asignatura. Y tendrá un valor del 60%

La calificación del alumno se obtendrá como resultado de aplicar la fórmula siguiente:

$$\text{Nota final} = 0.4 \times N1 + 0.6 \times N2$$

Siendo N1 la nota numérica correspondiente a la evaluación continua (escala 0-10) y N2 la nota numérica del examen final (escala 0-10).

Los alumnos repetidores tendrán el mismo régimen de asistencia a las clases que los que cursan la asignatura por primera vez.