

## ASIGNATURA: DISEÑO MOLECULAR

**MATERIA:** Diseño molecular

**MÓDULO:** Investigación de fármacos

**ESTUDIOS:** Master en Química Farmacéutica

Página 1 de 6

### CARACTERÍSTICAS GENERALES \*

**Tipo:**  Formación básica  Obligatorio  Optativa

Trabajo de fin de grado,  Prácticas externas

**Duración:** Semestre

**Semestre / s:** 1

**Número de créditos ECTS:** 4

**Idioma/s:** Inglés / Español

### DESCRIPCIÓN

**BREVE DESCRIPCIÓN Y JUSTIFICACIÓN** (El significado del sujeto en relación con los estudios. Entre 100 y 200 palabras.)

La I+D+i en la industria farmacéutica es un proceso multidisciplinar que involucra a químicos, farmacéuticos, médicos, biólogos, entre otros. Junto con la teoría y la experimentación, la simulación es el tercer pilar del conocimiento científico. Desde los años 90, la evolución de la computación ha permitido la incorporación de herramientas efectivas para el diseño de nuevos compuestos activos: el diseño molecular asistido por ordenador.

La química computacional es un campo multidisciplinar: informática, ciencia de la información, matemáticas, física, química-física, química cuántica, bioquímica, química orgánica, inorgánica y analítica, ingeniería y otros ámbitos relacionados. La asignatura presenta las principales técnicas y metodologías utilizadas en Química Médica, des del punto de vista del diseño de nuevos fármacos y principios activos.

**COMPETENCIAS** (Por supuesto que pone en relación a las habilidades de pre-asignados en el campo.)

#### **Competencias básicas**

- 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 (**CB6**).
- 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 (**CB7**).
- 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 (**CB9**).
- 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 (**CB10**).

## ASIGNATURA: DISEÑO MOLECULAR

**MATERIA:** Diseño molecular

**MÓDULO:** Investigación de fármacos

**ESTUDIOS:** Master en Química Farmacéutica

Página 2 de 6

### **Competencias específicas**

- Poseer conocimientos sobre las técnicas de diseño molecular asistido por ordenador para aplicarlos en investigación de fármacos (**E6**)
- Capacidad para plantear, discernir y aplicar las técnicas avanzadas de simulación computacional y usarlas para el diseño de compuestos con actividad biológica (**E7**)

### **Competencias transversales**

- Capacidad de comunicarse en inglés y de utilizar el inglés como idioma de trabajo (**T1**)
- Capacidad para valorar el impacto del uso de la química en el desarrollo sostenible de la sociedad (**T3**).

**REQUISITOS PREVIOS** \* (Módulos, materias, asignaturas o conocimientos necesarios para seguir al sujeto. Contener los sujetos que deben haber sido completados se pueden hacer.)

Los correspondientes para acceder a estudios de máster. Los estudiantes que hayan accedido al Master desde títulos de grado o licenciatura en química no requieran ningún complemento de formación adicional. Para otros títulos, debe haber completado el complemento formativo adicional con anterioridad.

**CONTENIDO** (secciones que componen el plan de estudios, a un segundo nivel de detalle).

#### **Capítulo 1:** Ordenadores y gráficos

1.0 Química Computacional. Simulación; 1.1 Supercomputación; 1.2 Programas, suites & bases de datos; 1.3 Representación molecular: Smiles, Z-Matrix; 1.4 Visualización, gráficos moleculares.

#### **Capítulo 2:** Mecánica cuántica, métodos “ab initio”

2.0 Limitaciones de la física clásica. Experimento de doble rendija; 2.1 Postulados de la mecánica cuántica; 2.2 Operadores y resolución aproximada; 2.3 Cálculos “Ab initio”. Hartree-Fock; 2.4 Representación matricial; 2.5 Densidad electrónica & Análisis de poblaciones; 2.6 Fuentes de error en los cálculos; 2.7 Métodos Post-HF; 2.8 Métodos semiempíricos; 2.9 Exactitud de los métodos.

#### **Capítulo 3:** Mecánica molecular

3.1 *Force Field*. Parametrizaciones; 3.2 Selección del método de cálculo; 3.3 Métodos híbridos.

#### **Capítulo 4:** Propiedades Moleculares. Descriptores

4.1 Datos disponibles del cálculo de OM; 4.2 Propiedades electrónicas; 4.3 Cargas; 4.4 Superficies; 4.5 Descriptores moleculares; 4.6 Similitud o distancia química entre moléculas.

## ASIGNATURA: DISEÑO MOLECULAR

**MATERIA:** Diseño molecular

**MÓDULO:** Investigación de fármacos

**ESTUDIOS:** Master en Química Farmacéutica

Página 3 de 6

**Capítulo 5:** Optimización. Espacio conformacional, problema del mínimo local. Simulación  
5.1 Algoritmos de optimización; 5.2 Coordenadas de reacción, estados de transición;  
5.3 Análisis conformacional. Búsqueda sistemática; 5.4 Búsqueda estocástica, Montecarlo-Metrópolis; 5.5 Dinámica molecular, hipótesis de ergodicidad; 5.6 *Simulated Annealing*;  
5.7 Tratamiento del solvente.

**Capítulo 6:** Métodos quimiométricos, QSAR y diseño molecular

6.1 Investigación en la industria farmacéutica; 6.2 Fases en el desarrollo de un fármaco;  
6.3 Cambios tecnológicos en la investigación de fármacos; 6.4 Dianas terapéuticas, modelos  
y mecanismos; 6.5 Compuestos precandidatos; 6.6 Diseño de fármacos basado en ligandos;  
6.7 Diseño de fármacos basado en estructura; 6.8 Optimización ADMET, selección de  
compuestos *druglike*; 6.9 Diseño racional de quimiotecas combinatorias.

**Capítulo 7:** Sesiones prácticas

### METODOLOGÍA

**ACTIVIDADES FORMATIVAS\*** (Completar la tabla relacionando actividades, carga de trabajo, en créditos ECTS, y competencias.)

<b>Actividades Formativas</b>	<b>ECTS</b>	<b>Competencias</b>
Sesiones de exposición de conceptos	31 / 1,15	E6, E7, T1, T3, CB6, CB7
Sesiones de resolución de ejercicios, problemas y casos	4 / 0,15	E6, E7, T1, T3, CB7
Seminarios	2 / 0,07	E6, E7, T1, T3, CB7, CB9
Presentaciones	0 / 0,0	E6, E7, T1, T3, CB9, T1
Actividades de estudio personal	67 / 2,48	E6, E7, T1, T3, CB6, CB7, CB9, CB10
Actividades de evaluación	4 / 0,15	E6, E7, T1, T3, CB9
<b>TOTAL</b>	<b>4,0</b>	

**EXPLICACIÓN DE LA METODOLOGÍA DIDÁCTICA** (justificando los métodos didácticos usados en relación a las competencias y los contenidos de la asignatura. Entre 100 y 200 palabras.)

La asignatura consta de unas 40-45 horas de clases magistrales. Se entrega al alumno todo el material que el profesor utiliza para las clases magistrales. La exposición de los temas se complementa con la discusión y resolución de problemas y casos prácticos.

## ASIGNATURA: DISEÑO MOLECULAR

**MATERIA:** Diseño molecular

**MÓDULO:** Investigación de fármacos

**ESTUDIOS:** Master en Química Farmacéutica

Página 4 de 6

El capítulo 7 consiste en diversas sesiones prácticas en las que se discutirán problemas actuales del ámbito del diseño de fármacos. Al final de cada apartado se realizarán actividades evaluables.

- Sesiones de exposición de conceptos: Exposición de contenidos mediante presentación o explicación (posiblemente incluyendo demostraciones) por parte de un profesor.
- Sesiones de resolución de ejercicios, problemas y casos: Resolución de ejercicios, planteamiento/resolución de problemas y exposición/discusión de casos por parte de un profesor con la participación activa de los estudiantes.
- Seminarios: Instrucción realizado por un profesor con el objetivo de revisar, discutir y resolver dudas sobre los materiales y temas presentados en las sesiones de exposición de conceptos y sesiones de resolución de ejercicios, problemas y casos.
- Actividades de estudio personal por parte de los estudiantes: Trabajo personal del estudiante necesario para adquirir las competencias de cada Materia y asimilar los conocimientos expuestos en las sesiones de exposición de conceptos y sesiones de resolución de ejercicios, problemas y casos, utilizando, cuando sea necesario, el material recomendado de consulta.
- Actividades de evaluación (exámenes, controles de seguimiento...): Pruebas orales y/o escritas realizadas durante el periodo lectivo de una asignatura o una vez finalizada la misma.

## EVALUACIÓN

**MÉTODOS DE EVALUACIÓN\*** (Completar la tabla relacionando métodos de evaluación, competencias y peso en la calificación de la asignatura.)

<i>Métodos de evaluación</i>	<b>%</b>	<b>Competencias</b>
Exámenes Finales	50	E6, E7, T1, T3 / CB6, CB7
Actividades de seguimiento del aprendizaje	25	E6, E7, T1, T3 / CB6, CB7
Trabajos y presentaciones	20	E6, E7, T1, T3 / CB9, CB10
Participación	5	T1

**RESULTADOS DE APRENDIZAJE** (Explicación de las realizaciones del alumno que permiten la evaluación de competencias, relacionándolos con las competencias y los métodos de evaluación.)

- El estudiante debe demostrar habilidad para plantear, discernir y aplicar las técnicas avanzadas de simulación computacional descritas y usarlas de manera adecuada para el diseño de compuestos con actividad biológica
- El estudiante debe demostrar habilidad para entender/resolver/interpretar resultados obtenidos en las modelizaciones

## ASIGNATURA: DISEÑO MOLECULAR

**MATERIA:** Diseño molecular

**MÓDULO:** Investigación de fármacos

**ESTUDIOS:** Master en Química Farmacéutica

Página 5 de 6

**CALIFICACIÓN** (Explicación del sistema de cómputo de la calificación de la asignatura.)

La calificación de la asignatura considera la puntuación obtenida en el examen final (EF), las actividades de seguimiento (AS), trabajos y presentaciones (T) y la participación (P), obteniendo una puntuación sobre 10. La nota final (FG) se calcula mediante la fórmula siguiente.

$$FG = 50\% EF + 25\% AS + 20\% T + 5\% P$$

**EVALUACIÓN DE LAS COMPETENCIAS** (Definir expresiones de cálculo para cada competencia en función de las actividades de evaluación correspondientes.)

Competencias	Métodos de evaluación	Observaciones
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 (CB6).	Examen final y actividades de seguimiento	50% EF + 50% AS
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 (CB7).	Examen final y actividades de seguimiento	50% EF + 50% AS
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 (CB9).	Trabajos y presentaciones	T
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 (CB10)	Trabajos y presentaciones	T
Poseer conocimientos sobre las técnicas de diseño molecular asistido por ordenador para aplicarlos en investigación de fármacos (E6)	Examen final, actividades de seguimiento, trabajos y presentaciones	50% EF+ 25% AS + 25% T
Capacidad para plantear, discernir y aplicar las técnicas avanzadas de simulación computacional y usarlas para el diseño de compuestos con actividad biológica (E7)	Examen final, actividades de seguimiento, trabajos y presentaciones	50% EF + 25% AS + 25% T
Capacidad de comunicarse en inglés y de utilizar el inglés como idioma de trabajo (T1)	Trabajos, presentaciones y participación	95% T + 5% P
Capacidad para valorar el impacto del uso de la química en el desarrollo sostenible de la sociedad (T3)	Trabajos, presentaciones y participación	95% T + 5% P

## ASIGNATURA: DISEÑO MOLECULAR

**MATERIA:** Diseño molecular

**MÓDULO:** Investigación de fármacos

**ESTUDIOS:** Master en Química Farmacéutica

Página 6 de 6

### BIBLIOGRAFÍA (recomendada y accesible al alumno.)

- Apuntes del profesor (disponibles en la plataforma Moodle, <http://moodle.iqs.url.edu>)
- Chemoinformatics in Drug Discovery, T.I. Oprea ed., Wiley 2005
- Computational Drug Design: A Guide for Computational and Medicinal Chemists, David C. Young, Wiley 2009, ISBN-10: 047012685X
- Chemoinformatics, J. Gasteiger, T. Engel, Wiley 2003, ISBN 3-527-30681-1
- Essentials of Computational Chemistry, C.J. Cramer, Wiley 2002. ISBN 0-471-48552-7
- Molecular Modelling, Andrew R. Leach, Ed Prentice Hall, 2nd Ed. 2001. ISBN 0-582-38210-6

### HISTÓRICO DEL DOCUMENTO

**MODIFICACIONES ANTERIORES** (Indicar fecha y autor/es, las más recientes primero)

17 de Octubre de 2017; Jordi Teixidó y Roger Estrada

29 de Agosto de 2016; Jordi Teixidó y Roger Estrada

30 de Setiembre de 2015; Jordi Teixidó y Roger Estrada

11 de Febrero de 2013; Jordi Teixidó y Roger Estrada

**ÚLTIMA REVISIÓN** (Indicar fecha y autor/es.)

17 de Julio de 2018; Jordi Teixidó y Roger Estrada