

ASSIGNATURA: DISSENY MOLECULAR

MATÈRIA: Disseny Molecular

MÒDUL: Recerca de fàrmacs

ESTUDIS: Màster en Química Farmacèutica

Página 1 de 6

CARACTERÍSTIQUES GENERALS *

tipus: formació bàsica obligatori optativa

Treball de fi de grau, pràctiques externes

Durada: Semestre

Semestre / s: 1

Nombre de crèdits ECTS: 4

Idioma / es: Anglès / Espanyol

DESCRIPCIÓ

BREU DESCRIPCIÓ I JUSTIFICACIÓ (El significat del subjecte en relació amb els estudis. Entre 100 i 200 paraules.)

La R+D+i en la indústria farmacèutica és un procés multidisciplinari que implica a químics, farmacèutics, metges, biòlegs, entre d'altres. Juntament amb la teoria i l'experimentació, la simulació és el tercer pilar del coneixement científic. Des de dels anys 90, l'evolució de de la computació ha permès la incorporació d'eines molt efectives per al disseny de nous compostos actius: el disseny assistit per ordinador.

La química computacional és un camp multidisciplinari: informàtica, ciència de la informació, matemàtiques, física, química-física, química quàntica, bioquímica, química orgànica, inorgànica i analítica, enginyeria i altres àmbits relacionats. L'assignatura presenta les principals tècniques i metodologies utilitzades en Química Mèdica, des del punt de vista del disseny de nous fàrmacs i principis actius.

COMPETÈNCIES (Per descomptat que posa en relació a les habilitats de pre-assignats al camp.)

Competències bàsiques

- Posseir i comprendre coneixements que aportin una base o oportunitat de ser originals en el desenvolupament i / o aplicació d'idees, sovint en un context d'investigació (**CB6**).
- Que els estudiants sàpiguen aplicar els coneixements adquirits i la seva capacitat de resolució de problemes en entorns nous o poc coneguts dins de contextos més amplis (o multidisciplinaris) relatius al seu camp d'estudi (**CB7**).
- Que els estudiants sàpiguen comunicar les seves conclusions, i els coneixements i raons últimes que les sustenten, a públics especialitzats i no especialitzats d'una manera clara i sense ambigüitats (**CB9**).
- Que els estudiants posseeixin les habilitats d'aprenentatge que els permetin continuar estudiant d'una manera que haurà de ser en gran mesura autodirigida o autònoma (**CB10**).

ASSIGNATURA: DISSENY MOLECULAR

MATÈRIA: Disseny Molecular

MÒDUL: Recerca de fàrmacs

ESTUDIS: Màster en Química Farmacèutica

Pàgina 2 de 6

Competències específiques

- Posseir coneixements sobre les tècniques de disseny molecular assistit per ordinador per aplicar-los en investigació de fàrmacs (**E6**)
- Capacitat per plantejar, discernir i aplicar les tècniques avançades de simulació computacional i usar-les per al disseny de compostos amb activitat biològica (**E7**)

Competències bàsiques

- Capacitat de comunicar-se en anglès i d'utilitzar l'anglès com a idioma de treball (**T1**)
- Capacitat per valorar l'impacte de l'ús de la química en el desenvolupament sostenible de la societat (**T3**)

REQUISITS PREVIS * (Mòduls, matèries, assignatures o coneixements necessaris per a seguir al subjecte. Contingut dels subjectes que han d'haver estat completats es poden fer.)

El corresponent per accedir a estudis de màster. Els estudiants que hagin accedit al Màster des de títols de grau o llicenciatura en química no requereixin cap complement de formació addicional. Per a altres títols, ha d'haver completat el complement formatiu addicional amb anterioritat.

CONTINGUT (Seccions que componen el pla d'estudis, a un segon nivell de detall).

Capítol 1: Ordinadors i gràfics

1.0 Química Computacional. Simulació; 1.1 Supercomputació; 1.2 Programaris, suites & bases de dades; 1.3 Representacions Moleculares: Smiles, Z-Matrix; 1.4 Visualització i gràfics moleculares.

Capítol 2: Mecànica quàntica, mètodes "ab initio"

2.0 Limitacions de la física clàssica. Experiment de doble escletxa; 2.1 Postulats de la mecànica quàntica; 2.2 Operadors i solució aproximada; 2.3 Càlculs "ab initio". Hartree-Fock; 2.4 Representació matricial; 2.5 Densitat electrònica & Anàlisi de poblacions; 2.6 Fonts d'error en els càlculs; 2.7 Mètodes Post-HF; 2.8 Mètodes semiempírics; 2.9 Exactitud dels mètodes.

Capítol 3: Mecànica Molecular

3.1 *Force Field*. Parametritzacions; 3.2 Selecció del mètode de càlcul; 3.3 Mètodes híbrids.

Capítol 4: Propietats Moleculares. Descriptors

4.1 Dades disponibles de càlculs d'OM.; 4.2 Propietats electròniques; 4.3 Càrregues; 4.4 Superfícies; 4.5 Descriptors moleculares; 4.6 Semblança o distància química entre molècules.

Capítol 5: Optimització. Espai conformacional, problema del mínim local. Simulació

5.1 Algorismes d'optimització; 5.2 Coordenades de reacció, estats de transició; 5.3 Anàlisi conformacional. Cerca sistemàtica; 5.4 Cerca aleatòria, Montecarlo-Metropolis; 5.5 Dinàmica Molecular, hipòtesis d'ergodicitat; 5.6 *Simulated Annealing*; 5.7 Tractament del solvent.

ASSIGNATURA: DISSENY MOLECULAR

MATÈRIA: Disseny Molecular

MÒDUL: Recerca de fàrmacs

ESTUDIS: Màster en Química Farmacèutica

Página 3 de 6

Capítol 6: Mètodes quimiomètrics, QSAR i Disseny Molecular

6.1 Recerca en la indústria farmacèutica; 6.2 Fases en el desenvolupament d'un fàrmac; 6.3 Canvis tecnològics en la recerca de fàrmacs; 6.4 Dianes terapèutiques, models i mecanismes; 6.5 Compostos precandidats; 6.6 Disseny de fàrmacs basat en lligands; 6.7 Disseny de fàrmacs basat en estructura; 6.8 Optimització ADMET, selecció de compostos *druglike*; 6.9 Disseny racional de quimiotèques virtuals.

Capítol 7: Sessions pràctiques

METODOLOGIA

ACTIVITATS FORMATIVES * (Completar la taula relacionant activitats, càrrega de treball, en crèdits ECTS, i competències.)

Activitats Formatives	Hores / ECTS	Competències
Sessions d'exposició de conceptes	31 / 1,15	E6, E7, T1, T3, CB6, CB7
Sessions de resolució d'exercicis, problemes i casos	4 / 0,15	E6, E7, T1, T3, CB7
Seminaris	2 / 0,07	E6, E7, T1, T3, CB7, CB9
Presentacions	0 / 0,0	E6, E7, T1, T3, CB9, T1
Activitats d'estudi personal	67 / 2,48	E6, E7, T1, T3, CB6, CB7, CB9, CB10
Activitats d'avaluació	4 / 0,15	E6, E7, T1, T3, CB9
TOTAL	4,0	

EXPLICACIÓ DE LA METODOLOGIA DIDÀCTICA (Justificant els mètodes didàctics usats en relació a les competències i els continguts de l'assignatura. Entre 100 i 200 paraules.)

L'assignatura consta d'unes 40-45 hores de classes magistrals. S'entrega a l'alumne tot el material que el professor utilitza per a les classes magistrals. L'exposició dels temes es complementa amb la discussió i resolució de problemes i casos pràctics.

El capítol 7 consisteix en diferents sessions pràctiques en les que es discutiran problemes actuals de l'àmbit del disseny de fàrmacs. Al final de cada apartat es realitzaran activitats avaluables.

ASSIGNATURA: DISSENY MOLECULAR

MATÈRIA: Disseny Molecular

MÒDUL: Recerca de fàrmacs

ESTUDIS: Màster en Química Farmacèutica

Pàgina 4 de 6

- Sessions d'exposició de conceptes: Exposició de continguts mitjançant presentació o explicació (possiblement incloent demostracions) per part d'un professor.
- Sessions de resolució d'exercicis, problemes i casos: Resolució d'exercicis, plantejament / resolució de problemes i exposició / discussió de casos per part d'un professor amb la participació activa dels estudiants.
- Seminaris: Instrucció realitzat per un professor amb l'objectiu de revisar, discutir i resoldre dubtes sobre els materials i temes presentats en les sessions d'exposició de conceptes i sessions de resolució d'exercicis, problemes i casos.
- Activitats d'estudi personal per part dels estudiants: Treball personal de l'estudiant necessari per adquirir les competències de cada Matèria i assimilar els coneixements exposats en les sessions d'exposició de conceptes i sessions de resolució d'exercicis, problemes i casos, utilitzant, quan sigui necessari, el material recomanat de consulta.
- Activitats d'avaluació (exàmens, controls de seguiment ...): Proves orals i / o escrites realitzades durant el període lectiu d'una assignatura o un cop finalitzada la mateixa.

AVALUACIÓ

MÈTODES D'AVAUACIÓ * (Completar la taula relacionant mètodes d'avaluació, competències i pes en la qualificació de l'assignatura.)

Mètodes d'avaluació	%	Competències
Exàmens Finals	50%	E6, E7, T1, T3 / CB6, CB7
Activitats de seguiment de l'aprenentatge	25%	E6, E7, T1, T3 / CB6, CB7
Treballs i presentacions	20%	E6, E7, T1, T3 / CB9, CB10
Participació	5%	T1

RESULTATS D'APRENTATGE (Explicació de les realitzacions de l'alumne que permeten l'avaluació de competències, relacionant-los amb les competències i els mètodes d'avaluació.)

Els estudiants han de demostrar el seu coneixement del disseny de fàrmacs assistit per ordinador i dels mètodes disponibles per a aquests finalitat.

QUALIFICACIÓ (Explicació del sistema de còmput de la qualificació de l'assignatura.)

La qualificació de l'assignatura considera la puntuació obtinguda en l'examen final (EF), les activitats de seguiment (AS), treballs i presentacions (T) i la participació (P), obtenint una puntuació sobre 10. La nota final (FG) es calcula mitjançant la fórmula següent.

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

ASSIGNATURA: DISSENY MOLECULAR

MATÈRIA: Disseny Molecular

MÒDUL: Recerca de fàrmacs

ESTUDIS: Màster en Química Farmacèutica

Página 5 de 6

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

Competències	Mètodes d'avaluació	Observacions
Posseir i comprendre coneixements que aportin una base o oportunitat de ser originals en el desenvolupament i / o aplicació d'idees, sovint en un context d'investigació (CB6).	Examen final i activitats de seguiment	50% EF + 50% AS
Que els estudiants sàpiguen aplicar els coneixements adquirits i la seva capacitat de resolució de problemes en entorns nous o poc coneguts dins de contextos més amplis (o multidisciplinaris) relatius al seu camp d'estudi (CB7).	Examen final i activitats de seguiment	50% EF + 50% AS
Que els estudiants sàpiguen comunicar les seves conclusions, i els coneixements i raons últimes que les sustenten, a públics especialitzats i no especialitzats d'una manera clara i sense ambigüitats (CB9).	Treballs i presentacions	T
Que els estudiants posseïxin les habilitats d'aprenentatge que els permetin continuar estudiant d'una manera que haurà de ser en gran mesura autòdrida o autònoma (CB10)	Treballs i presentacions	T
Posseir coneixements sobre les tècniques de disseny molecular assistit per ordinador per aplicar-los en investigació de fàrmacs (E6)	Examen final i activitats de seguiment Treballs i presentacions	50% EF+ 25% AS + 25% T
Capacitat per plantejar, discernir i aplicar les tècniques avançades de simulació computacional i usar-les per al disseny de compostos amb activitat biològica (E7)	Examen final i activitats de seguiment Treballs i presentacions	50% EF + 25% AS + 25% T
Capacitat de comunicar-se en anglès i d'utilitzar l'anglès com a idioma de treball (T1)	Treballs, presentacions i participació	95% T + 5% P

BIBLIOGRAFIA (Recomanada i accessible a l'alumne.)

- Apunts del professor (disponibles a 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

ASSIGNATURA: DISSENY MOLECULAR

MATÈRIA: Disseny Molecular

MÒDUL: Recerca de fàrmacs

ESTUDIS: Màster en Química Farmacèutica

Página 6 de 6

HISTÒRIC DEL DOCUMENT

MODIFICACIONS ANTERIORS (Indicar data i autor / s, les més recents primer)

29 d'agost de 2016; Jordi Teixidó i Roger Estrada

30 de setembre de 2015; Jordi Teixidó i Roger Estrada

11 de febrer de 2013; Jordi Teixidó i Roger Estrada

UPDATED

17 de juliol de 2018; Jordi Teixidó i Roger Estrada