

## ASIGNATURA: DISEÑO MOLECULAR

**MATERIA:** Diseño molecular

**MODULO:** Mención Diseño y producción de Fármacos

**ESTUDIOS:** Grado en Farmacia

Página 1 de 9

### CARACTERÍSTICAS GENERALES\*

**Tipos:**  Formación básica,  Obligatoria,  Optativa

Trabajo fin de grado,  Prácticas Tuteladas

Prácticas Orientadas a la Mención

**Duración:** Semestral

**Semestre/s:** S9

**Número de créditos ECTS:** 6

**Idioma/s:** Inglés

## DESCRIPCIÓN

### BREVE DESCRIPCIÓN Y JUSTIFICACIÓN

La I+D+i en la industria farmacéutica es un proceso multidisciplinar que involucra a químicos, farmacéuticos, médicos y 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 modelización molecular es un campo multidisciplinar: informática, ciencia de la información, matemáticas, física, química, bioquímica, farmacia y otros ámbitos relacionados. La asignatura presenta las principales técnicas y metodologías utilizadas en Química Farmacéutica, des del punto de vista del diseño de nuevos fármacos y principios activos.

### COMPETENCIAS\*

#### Competencias Generales:

- G-1 Identificar, diseñar, obtener, analizar, controlar y producir fármacos y medicamentos, así como otros productos y materias primas de interés sanitario de uso humano o veterinario.
- G-3 Saber aplicar el método científico y adquirir habilidades en el manejo de la legislación, fuentes de información, bibliografía, elaboración de protocolos y demás aspectos que se consideran necesarios para recopilar e interpretar datos como el diseño y evaluación crítica de ensayos preclínicos y clínicos.

\* Estas características no se pueden modificar sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).

## ASIGNATURA: DISEÑO MOLECULAR

**MATERIA:** Diseño molecular

**MODULO:** Mención Diseño y producción de Fármacos

**ESTUDIOS:** Grado en Farmacia

Página 2 de 9

- G-16 Demostrar capacidad para la comunicación oral y escrita en inglés.
- G-17 Tener destrezas informáticas suficientes para manejar procesadores de texto, hojas de cálculo, bases de datos, presentaciones y búsqueda por internet. Conocer la situación actual de la telemática en relación con las ciencias de la salud.

### Competencias Específicas:

- E-Q1 Identificar, diseñar, obtener, analizar y producir principios activos, fármacos y otros productos y materiales de interés sanitario.
- E-Q8 Conocer y comprender la naturaleza y comportamiento de los grupos funcionales en moléculas orgánicas.
- E-FM2 Aplicar técnicas computacionales y de procesamiento de datos, en relación con información referente a datos físicos, químicos y biológicos

### Competencias Transversales de Nivel de Máster:

- T-1M Tener conocimientos avanzados y demostrar, en un contexto de investigación científica y tecnológica o altamente especializado, una comprensión detallada y fundamentada de los aspectos teóricos y prácticos y de la metodología de trabajo en uno o más campos de estudio.
- T-2M Ser capaces de controlar y predecir la evolución de situaciones complejas o formular juicios a partir de información incompleta mediante el desarrollo de nuevas e innovadoras metodologías de trabajo adaptadas al ámbito científico/investigador, tecnológico o profesional concreto, en general multidisciplinar, en el que se desarrolle su actividad.
- T-3M Demostrar la autonomía suficiente como para participar en proyectos de investigación y colaboraciones científicas o tecnológicas dentro su ámbito temático, en contextos interdisciplinares y, en su caso, con una alta componente de transferencia del conocimiento.

### **REQUISITOS PREVIOS\***

Se recomienda tener conocimientos previos de Química Orgánica y Determinación Estructural

\* Estas características no se pueden modificar sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).

## ASIGNATURA: DISEÑO MOLECULAR

**MATERIA:** Diseño molecular

**MODULO:** Mención Diseño y producción de Fármacos

**ESTUDIOS:** Grado en Farmacia

Página 3 de 9

### CONTENIDOS

#### **Capítulo 1:** Ordenadores y representaciones moleculares

1.1 Química Computacional; 1.2 Supercomputación; 1.3 Programas, suites & bases de datos; 1.4 Visualización; 1.5 Representación molecular; 1.6 Tipos de ficheros; 1.7 Bases de datos.

#### **Capítulo 2:** Mecánica molecular

2.1 Mecánica molecular; 2.2 *Force Field*.

#### **Capítulo 3:** Propiedades y descriptores moleculares

3.1 Descriptores moleculares; 3.2 Fingerprints; 3.3 Farmacóforos; 3.4 Similitud o distancia química entre moléculas.

#### **Capítulo 4:** Quimioinformática

4.1 Estrategias para el diseño de fármacos; 4.2 Métodos QSPR/QSAR; 4.3 Campos moleculares; 4.4 Búsqueda farmacofórica; 4.5 Sistemas biomoleculares; 4.6 Docking molecular; 4.7 Dinámica molecular; 4.8 Diseño *De Novo*; 4.9 Hit to Lead.

#### **Capítulo 5:** Explorando el espacio conformacional

5.1 Algoritmos de optimización; 5.2 Coordenadas de reacción; 5.3 Análisis conformacional; 5.4 Explorando la superficie de energía potencial.

#### **Capítulo 6:** Mecánica cuántica, métodos “ab initio”

6.1 Limitaciones de la física clásica; 6.2 Postulados de la mecánica cuántica; 6.3 Cálculos “Ab initio”. Hartree-Fock; 6.4 Fuentes de error en los cálculos; 6.5 Métodos Post-HF; 6.6 Métodos semiempíricos; 6.7 Selección del método de cálculo.

#### **Capítulo 7:** Desarrollo de fármacos

7.1 La investigación en la industria farmacéutica; 7.2 Fases en el desarrollo de fármacos; 7.3 Dianas terapéuticas, modelos y mecanismos; 7.4 Estudio de los compuestos candidatos.

\* Estas características no se pueden modificar sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).

## ASIGNATURA: DISEÑO MOLECULAR

**MATERIA:** Diseño molecular

**MODULO:** Mención Diseño y producción de Fármacos

**ESTUDIOS:** Grado en Farmacia

Página 4 de 9

### METODOLOGIA

#### ACTIVIDADES FORMATIVAS

| Actividades Formativas*<br>(Memoria GF)  | Actividades Formativas<br>(Sigma)                                 | Créditos*<br>ECTS | Competencias  |
|--|---|-------------------|---|
| Sesiones teóricas  | Sesiones de exposición de conceptos                               | 1,8               | G-1, G-3, G-16, G-17, E-Q1, E-Q8, E-FM2, T-1M, T-2M, T-3M |
| Resolución de ejercicios y problemas   | Sesiones de resolución de ejercicios, problemas y casos (1)       | -                 | -   |
| Actividades integradoras del conocimiento: casos, seminarios, Trabajos dirigidos y aprendizaje cooperativo | Seminarios  | 0,4               | G-1, G-3, G-16, G-17, E-Q1, E-Q8, E-FM2, T-1M, T-2M, T-3M |
| Sesiones prácticas: laboratorio o simulaciones   | Trabajo práctico / laboratorio                                    | -                 | -   |
| -  | Presentaciones (2)  | -                 | -   |
| Estudio personal del alumno  | Actividades de estudio personal por parte de los estudiantes      | 3,7               | G-1, G-3, G-16, G-17, E-Q1, E-Q8, E-FM2, T-1M, T-2M, T-3M |
| Actividades de evaluación  | Actividades de evaluación (exámenes, controles de seguimiento...) | 0,1               | G-1, G-3, G-16, G-17, E-Q1, E-Q8, E-FM2, T-1M, T-2M, T-3M |
|  | <b>TOTAL</b>  | <b>6,0</b>        |   |

GF: Grado en Farmacia

(1) En el GF el epígrafe de “casos” de la ficha de la asignatura en Sigma está incluido en “Actividades integradoras del conocimiento”

(3) En el GF el epígrafe “presentaciones” de la ficha de la asignatura en Sigma está incluido en “Actividades integradoras del conocimiento”

\* Estas características no se pueden modificar sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).

## ASIGNATURA: DISEÑO MOLECULAR

**MATERIA:** Diseño molecular

**MODULO:** Mención Diseño y producción de Fármacos

**ESTUDIOS:** Grado en Farmacia

Página 5 de 9

### EXPLICACIÓN DE LA METODOLOGIA DIDÁCTICA

- 1. Método expositivo.** Lección magistral participativa, trabajo a través de las exposiciones de los diferentes contenidos teórico-prácticos e implicando al estudiante con la combinación de actividades y ejercicios en el aula. Incentivando al alumno a formular preguntas que comporten un razonamiento personal. Impartición de contenidos, explicación y demostración de capacidades, habilidades y conocimientos en el aula o a través de medios audiovisuales.
- 3. Simulaciones.** Aprendizaje basado en el proceso de utilizar un modelo de un sistema real y llevar a término experiencias con él, con la finalidad de adquirir determinadas habilidades, comprender el comportamiento del sistema o evaluar nuevas estrategias para el funcionamiento del sistema. Las actividades se realizan en el aula, sala de demostraciones o espacios con equipamiento especializado como los laboratorios, salas de informática, salas de simulación o salas de demostraciones, supervisadas por el profesor. Las simulaciones pueden ser informáticas, sobre estructuras anatómicas, casos clínicos, análisis diagnósticos, problemas, etc.
- 4. Resolución de ejercicios o problemas,** desarrollando soluciones adecuadas mediante la realización de rutinas, aplicando fórmulas o algoritmos e interpretando resultados. Se suele utilizar como complemento de la lección magistral.
- 5. Aprendizaje basado en problemas o casos,** permitiendo que los estudiantes experimenten, ensayen e indaguen sobre la naturaleza de situaciones, fenómenos y actividades cotidianas fomentando el análisis, el trabajo en equipo y la toma de decisiones.
- 7. Actividades de evaluación.** Ejercicios para evaluar el grado de asunción de las competencias (conocimientos, habilidades, valores) por parte de los alumnos. De forma continuada o puntual.

\* Estas características no se pueden modificar sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).

## ASIGNATURA: DISEÑO MOLECULAR

**MATERIA:** Diseño molecular

**MODULO:** Mención Diseño y producción de Fármacos

**ESTUDIOS:** Grado en Farmacia

Página 6 de 9

### EVALUACIÓN

#### MÉTODOS DE EVALUACIÓN

| Métodos de evaluación *<br>(Memoria GF)  | Métodos de evaluación<br>(Sigma)       | Peso*(2) | Competencias  |
|--|--|----------|---|
| Examen final   | Examen final                           | 50%      | G-1, G-3, G-16, G-17,<br>E-Q1, E-Q8, E-FM2,<br>T-1M, T-2M, T-3M |
| -  | Examen/es parcial/es (1)               | -        | -   |
| Seguimiento del aprendizaje (incluye controles, casos, ejercicios, problemas, participación, evaluación On-Line, autoevaluación) | Actividades de seguimiento             | 20%      | G-1, G-3, G-16, G-17,<br>E-Q1, E-Q8, E-FM2,<br>T-1M, T-2M, T-3M |
| Trabajos y presentaciones  | Trabajos y presentaciones              | 30%      | G-1, G-3, G-16, G-17,<br>E-Q1, E-Q8, E-FM2,<br>T-1M, T-2M, T-3M |
| Trabajo práctico o experimental  | Trabajo experimental o de campo        | -        | -   |
| Evaluación TFG   | Proyectos                              | -        | -   |
| Prácticas externas (prácticas tuteladas y prácticas orientadas a la mención)   | Valoración de la empresa o institución | -        | -   |
| -  | Participación (1)                      | -        | -   |
|  |  | 100%     |   |

GF: Grado en Farmacia

1) En el GF los epígrafes "Examen/es parcial/es" y "la Participación" de la ficha de la asignatura en Sigma están incluidos en "Seguimiento del aprendizaje"

(2) Los valores pueden oscilar  $\pm 5\%$  respecto el valor definido en la memoria del GF (sumatorio final 100%)

\* Estas características no se pueden modificar sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).

## ASIGNATURA: DISEÑO MOLECULAR

**MATERIA:** Diseño molecular

**MODULO:** Mención Diseño y producción de Fármacos

**ESTUDIOS:** Grado en Farmacia

Página 7 de 9

### RESULTADOS DEL APRENDIZAJE

- Conocer el proceso de Diseño de Moléculas (Fármacos) Asistido por Ordenador.
- Demostrar el conocimiento de las herramientas computacionales disponibles correspondientes.
- Saber establecer relaciones estructura propiedad/actividad (QSPR/QSAR)

### CALIFICACIÓN

#### Primera convocatoria

La calificación de la asignatura considera:

- Examen final (EF) (50%)
- Actividades de seguimiento (AS) (25%)
- Trabajos y presentaciones (T) (25%)

Todas se califican sobre 10

Para poderse presentar al examen final es condición indispensable que la nota de los trabajos y presentaciones (T) sea mayor o igual a 5,0. En caso contrario deberá recuperarse previamente la nota de los trabajos y presentaciones.

La nota final (NF) se calcula mediante la fórmula siguiente.

$$NF = 50\% EF + 25\% AS + 25\% T$$

La nota del examen final ha de ser igual o superior a 4,0 para promediar en la fórmula de cálculo de la nota final.

La asignatura se aprueba si la nota final es igual o superior a cinco.

#### Segunda convocatoria

En caso de no haber alcanzado la nota mínima de 5,0, deberá realizar un examen de recuperación (ER) (del cual se obtendrá una nota ER) que sustituye a EF. Las calificaciones obtenidas en AS y T se mantienen.

\* Estas características no se pueden modificar sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).

## ASIGNATURA: DISEÑO MOLECULAR

**MATERIA:** Diseño molecular

**MODULO:** Mención Diseño y producción de Fármacos

**ESTUDIOS:** Grado en Farmacia

Página 8 de 9

La nota final se calcula:

$$NF = 50\% ER + 25\% AS + 25\% T$$

La nota del examen de recuperación ha de ser igual o superior a 4,0 para promediar en la fórmula de cálculo de la nota final.

La asignatura se aprueba si la nota final es igual o superior a cinco.

### Siguientes convocatorias

En caso de no superar la asignatura en segunda convocatoria, no se conservará ninguna nota para el curso siguiente y se evaluará en un examen final único que incluya todos los contenidos de la asignatura.

La asignatura se aprueba si la nota final es igual o superior a cinco.

### EVALUACIÓN DE LAS COMPETENCIAS

Para la evaluación de las competencias G-1, G-3, G-16, G-17, E-Q1, E-Q8, E-FM2, T-1M, T-2M, T-3M se utilizará como indicador la nota de la asignatura.

### BIBLIOGRAFÍA

- 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

\* Estas características no se pueden modificar sin la aprobación de los órganos responsables de las estructuras académicas de nivel superior (materia, módulo y/o plan de estudios).





## ASIGNATURA: DISEÑO MOLECULAR

**MATERIA:** Diseño molecular

**MODULO:** Mención Diseño y producción de Fármacos

**ESTUDIOS:** Grado en Farmacia

Página 9 de 9

## HISTÓRICO DEL DOCUMENTO

### MODIFICACIONES ANTERIORES

Abril 2018, Dra. Ana Cuartero

Julio 2018, Dr. Roger Estrada

Julio 2019, Dr. Roger Estrada

Junio 2020, Dr. Roger Estrada

### ÚLTIMA REVISIÓN

Julio 2021, Dr. Roger Estrada