

## ASSIGNATURA: DISSENY MOLECULAR

**MATÈRIA:** Disseny Molecular

**MÒDUL:** Menció Disseny i producció de Fàrmacs

**ESTUDIS:** Grau en Farmàcia

pàgina1 de 9

### CARACTERÍSTIQUES GENERALS \*

**Tipus:**  Formació bàsica,  Obligatòria,  Optativa  
 Treball de fi de grau,  Pràctiques Tutelades  
 Pràctiques Orientades a la Menció

**Durada:** Semestral

**Semestre / s:** S9

**Nombre de crèdits ECTS:** 6

**Idioma / es:** Anglès

## DESCRIPCIÓ

### BREU DESCRIPCIÓ I JUSTIFICACIÓ

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 modelització molecular és un camp multidisciplinari: informàtica, ciència de la informació, matemàtiques, física, química, bioquímica, farmàcia i altres àmbits relacionats. L'assignatura presenta les principals tècniques i metodologies utilitzades en Química Farmacèutica, des del punt de vista del disseny de nous fàrmacs i principis actius.

### COMPETÈNCIES \*

#### Competències Generals:

- G-1 Identificar, dissenyar, obtenir, analitzar, controlar i produir fàrmacs i medicaments, així com altres productes i matèries primeres d'interès sanitari d'ús humà o veterinari.
- G-3: Saber aplicar el mètode científic i adquirir habilitats en el maneig de la legislació, fonts d'informació, bibliografia, elaboració de protocols i altres aspectes que es consideren necessaris per recopilar i interpretar dades com el disseny i avaluació crítica d'assajos pre-clínic i clínic.

\* Aquestes característiques no es poden modificar sense l'aprovació dels òrgans responsables de les estructures acadèmiques de nivell superior (matèria, mòdul i/o pla d'estudis).

## ASSIGNATURA: DISSENY MOLECULAR

**MATÈRIA:** Disseny Molecular

**MÒDUL:** Menció Disseny i producció de Fàrmacs

**ESTUDIS:** Grau en Farmàcia

pàgina2 de 9

- G-16 Demostrar capacitat per a la comunicació oral i escrita en anglès.
- G-17: Tenir destreses informàtiques suficients per manejar processadors de text, fulls de càlcul, bases de dades, presentacions i recerca per internet. Conèixer la situació actual de la telemàtica en relació amb les ciències de la salut.

### Competències Específiques:

- E-Q1 Identificar, dissenyar, obtenir, analitzar i produir principis actius, fàrmacs i altres productes i materials d'interès sanitari.
- E-Q8 Conèixer i comprendre la naturalesa i comportament dels grups funcionals en molècules orgàniques.
- E-FM2 Aplicar tècniques computacionals i de processament de dades en relació a informació referent a dades físiques, químiques i biològiques.

### Competències Transversals de Nivell de Màster:

- T-1M Tenir coneixements avançats i demostrar, en un context d'investigació científica i tecnològica o altament especialitzat, una comprensió detallada i fonamentada dels aspectes teòrics i pràctics i de la metodologia de treball en un o més camps d'estudi.
- T-2M Ser capaços de controlar i predir l'evolució de situacions complexes o formular judicis a partir d'informació incompleta mitjançant el desenvolupament de noves i innovadores metodologies de treball adaptades a l'àmbit científic/investigador, tecnològic o professional concret, en general multidisciplinari, en el qual es desenvolupi la seva activitat.
- T-3M Demostrar l'autonomia suficient com per participar en projectes d'investigació i col·laboracions científiques o tecnològiques dins el seu àmbit temàtic, en contextos interdisciplinaris i, si s'escau, amb una alta component de transferència del coneixement.

### **REQUISITS PREVIS \***

Es recomana tenir coneixements previs de Química Orgànica i Determinació Estructural

\* Aquestes característiques no es poden modificar sense l'aprovació dels òrgans responsables de les estructures acadèmiques de nivell superior (matèria, mòdul i/o pla d'estudis).

## ASSIGNATURA: DISSENY MOLECULAR

**MATÈRIA:** Disseny Molecular

**MÒDUL:** Menció Disseny i producció de Fàrmacs

**ESTUDIS:** Grau en Farmàcia

pàgina3 de 9

### CONTINGUTS

#### Capítol 1: Ordinadors i representacions moleculars

1.1 Química Computacional; 1.2 Supercomputació; 1.3 Programes, suites & bases de dades; 1.4 Visualització; 1.5 Representació molecular; 1.6 Tipus de fitxers; 1.7 Bases de dades.

#### Capítol 2: Mecànica molecular

2.1 Mecànica molecular; 2.2 *Force Field*.

#### Capítol 3: Propietats i descriptors moleculars

3.1 Descriptors moleculars; 3.2 *Fingerprints*; 3.3 Farmacòfors; 3.4 Semblança o distància química entre molècules.

#### Capítol 4: Quimioinformàtica

4.1 Estratègies pel disseny de fàrmacs; 4.2 Mètodes QSPR/QSAR; 4.3 Camps moleculars; 4.4 Cerca farmacofòrica; 4.5 Sistemes biomoleculars; 4.6 *Docking* molecular; 4.7 Dinàmica molecular; 4.8 Diseny *De Novo*; 4.9 *Hit to Lead*.

#### Capítol 5: Explorant l'espai conformacional

5.1 Algoritmes d'optimització; 5.2 Coordenades de reacció; 5.3 Anàlisi conformacional; 5.4 Explorant la superfície d'energia potencial.

#### Capítol 6: Mecànica quàntica, mètodes *ab initio*

6.1 Limitacions de la física clàssica; 6.2 Postulats de la mecànica quàntica; 6.3 Càlculs "*Ab initio*". Hartree-Fock; 6.4 Fonts d'error en els càlculs; 6.5 Mètodes Post-HF; 6.6 Mètodes semiempírics; 6.7 Selecció del mètode de càlcul.

#### Capítol 7: Desenvolupament de fàrmacs

7.1 La recerca en la indústria farmacèutica; 7.2 Fases en el desenvolupament de fàrmacs; 7.3 Dianes terapèutiques, models i mecanismes; 7.4 Estudi dels compostos candidats.

\* Aquestes característiques no es poden modificar sense l'aprovació dels òrgans responsables de les estructures acadèmiques de nivell superior (matèria, mòdul i/o pla d'estudis).

## ASSIGNATURA: DISSENY MOLECULAR

**MATÈRIA:** Disseny Molecular

**MÒDUL:** Menció Disseny i producció de Fàrmacs

**ESTUDIS:** Grau en Farmàcia

pàgina4 de 9

### METODOLOGIA

#### ACTIVITATS FORMATIVES

Activitats Formatives * (Memòria GF)	activitats Formatives (Sigma)	Crèdits * ECTS	Competències
Sessions teòriques	Sessions d'exposició de conceptes	1,8	G-1, G-3, G-16, G-17, E-Q1, E-Q8, E-FM2, T-1M, T-2M, T-3M
Resolució d'exercicis i problemes	Sessions de resolució d'exercicis, problemes i casos(1)	-	-
Activitats integradores del coneixement: casos, seminaris, treballs dirigits i aprenentatge cooperatiu	Seminaris	0,4	G-1, G-3, G-16, G-17, E-Q1, E-Q8, E-FM2, T-1M, T-2M, T-3M
Sessions pràctiques: laboratori o simulacions	Treball pràctic/laboratori	-	-
-	Presentacions (2)	-	-
Estudi personal de l'alumne	Activitats d'estudi personal per part dels estudiants	3,7	G-1, G-3, G-16, G-17, E-Q1, E-Q8, E-FM2, T-1M, T-2M, T-3M
Activitats d'avaluació	Activitats d'avaluació (exàmens, controls de seguiment ...)	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: Grau en Farmàcia

(1) En el GF l'epígraf de "casos" de la fitxa de l'assignatura en Sigma està inclòs en "activitats integradores del coneixement"

(2) Al GF l'epígraf "presentacions" de la fitxa de l'assignatura en Sigma està inclòs en "Activitats integradores del coneixement"

\* Aquestes característiques no es poden modificar sense l'aprovació dels òrgans responsables de les estructures acadèmiques de nivell superior (matèria, mòdul i/o pla d'estudis).

## ASSIGNATURA: DISSENY MOLECULAR

**MATÈRIA:** Disseny Molecular

**MÒDUL:** Menció Disseny i producció de Fàrmacs

**ESTUDIS:** Grau en Farmàcia

pàgina5 de 9

### EXPLICACIÓ DE LA METODOLOGIA DIDÀCTICA

- 1. Mètode expositiu.** Lliçó magistral participativa, treball a través de les exposicions dels diferents continguts teòric-pràctics i implicant a l'estudiant amb la combinació d'activitats i d'exercicis a l'aula. Incentivant l'alumne a formular preguntes que comportin un raonament personal. Exposició de continguts, explicació i demostració de capacitats, habilitats i coneixements a l'aula a través de mitjans audiovisuals.
- 3. Simulacions:** aprenentatge basat en el procés d'utilitzar un model d'un sistema real i dur a terme experiències amb ell, amb la finalitat d'adquirir determinades habilitats, comprendre el comportament del sistema. Les activitats es realitzen a l'aula, sala de demostracions o espais amb equipament especialitzat com els laboratoris, sales d'informàtica, sales de simulació o sales de demostracions, supervisades pel professor. Les visualitzacions poden ser informàtiques, sobre models anatòmics, casos clínics, anàlisis diagnòstiques, problemes, etc.
- 4. Resolució d'exercicis o problemes,** desenvolupant solucions adequades mitjançant la realització de rutines, aplicant fórmules o algorismes i interpretant resultats. Es sol utilitzar com a complement de la lliçó magistral.
- 5. Aprenentatge basat en problemes o casos,** Permetent que els estudiants experimentin, assagin i indaguin sobre la naturalesa de situacions, fenòmens i activitats quotidianes fomentant l'anàlisi, el treball en equip i la presa de decisions.
- 7. Activitats d'avaluació.** Exercicis per avaluar el grau d'assumpció de les competències (coneixements, habilitats, valors) per part dels alumnes. De forma continuada o puntual.

\* Aquestes característiques no es poden modificar sense l'aprovació dels òrgans responsables de les estructures acadèmiques de nivell superior (matèria, mòdul i/o pla d'estudis).

## ASSIGNATURA: DISSENY MOLECULAR

**MATÈRIA:** Disseny Molecular

**MÒDUL:** Menció Disseny i producció de Fàrmacs

**ESTUDIS:** Grau en Farmàcia

pàgina6 de 9

### AVALUACIÓ

#### MÈTODES D'AVALUACIÓ

Mètodes d'avaluació * (Memòria GF)	Mètodes d'avaluació (Sigma)	Pes * (2)	Competències
Examen final	Examen final	50%	G-1, G-3, G-16, G-17, E-Q1, E-Q8, E-FM2, T-1M, T-2M, T 3M
-	Examen/s parcial/s (1)	-	-
Seguiment de l'aprenentatge (inclou controls, casos, exercicis, problemes, participació, avaluació On-line, autoavaluació)	Activitats de seguiment	20%	G-1, G-3, G-16, G-17, E-Q1, E-Q8, E-FM2, T-1M, T-2M, T 3M
Treballs i presentacions	Treballs i presentacions	30%	G-1, G-3, G-16, G-17, E-Q1, E-Q8, E-FM2, T-1M, T-2M, T-3M
Treball pràctic o experimental	Treball experimental o de camp	-	-
Avaluació TFG	Projectes	-	-
Pràctiques externes (pràctiques tutelades i pràctiques orientades a la menció)	Valoració de l'empresa o institució	-	-
-	Participació (1)	-	-
		100%	

GF: Grau en Farmàcia

1) En el GF els epígrafs "Examen/s parcial/s" i "la Participació" de la fitxa de l'assignatura en Sigma estan inclosos en "Seguiment de l'aprenentatge"

(2) Els valors poden oscil·lar  $\pm 5\%$  respecte el valor definit en la memòria del GF (sumatori final 100%)

\* Aquestes característiques no es poden modificar sense l'aprovació dels òrgans responsables de les estructures acadèmiques de nivell superior (matèria, mòdul i/o pla d'estudis).

## ASSIGNATURA: DISSENY MOLECULAR

**MATÈRIA:** Disseny Molecular

**MÒDUL:** Menció Disseny i producció de Fàrmacs

**ESTUDIS:** Grau en Farmàcia

pàgina 7 de 9

### RESULTATS DE L'APRENTATGE

- Conèixer el procés del Disseny Molecular (Fàrmacs) assistit per ordinador.
- Demostrar el coneixement de les eines computacionals disponibles corresponents.
- Saber establir relacions estructura propietat/activitat (QSPR/QSAR)

### QUALIFICACIÓ

#### Primera convocatòria

La qualificació de l'assignatura considera:

- Examen final (EF) (50%)
- Activitats de seguiment (AS) (25%)
- Treballs i presentacions (T) (25%)

Totes es qualifiquen sobre 10.

Per poder-se presentar a l'examen final és condició indispensable que la nota dels treballs i presentacions (T) sigui major o igual a 5,0. En cas contrari, haurà de recuperar prèviament la nota dels treballs i presentacions.

La nota final (NF) es calcula mitjançant la fórmula següent.

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

La nota de l'examen final ha de ser igual o superior a 4,0 para fer mitjana dins la fórmula de càlcul de la nota final.

L'assignatura s'aprova si la nota final és igual o superior a cinc.

#### Segona convocatòria

En cas de no haver assolit la nota mínima de 5,0, s'haurà de realitzar un examen de recuperació (ER) (del qual s'obtindrà una nota ER) que substitueix a EF. Les qualificacions obtingudes en AS i T es mantenen.

\* Aquestes característiques no es poden modificar sense l'aprovació dels òrgans responsables de les estructures acadèmiques de nivell superior (matèria, mòdul i/o pla d'estudis).

## ASSIGNATURA: DISSENY MOLECULAR

**MATÈRIA:** Disseny Molecular

**MÒDUL:** Menció Disseny i producció de Fàrmacs

**ESTUDIS:** Grau en Farmàcia

pàgina8 de 9

La nota final es calcula:

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

La nota de l'examen de recuperació ha de ser igual o superior a 4,0 per poder fer mitjana dins la fórmula de càlcul de la nota final.

L'assignatura s'aprova si la nota final és igual o superior a cinc.

### Següents convocatòries

En cas de no superar l'assignatura en segona convocatòria, no se conservarà cap nota pel curs següent i s'avaluarà en un examen final únic que inclogui tots els continguts de l'assignatura.

L'assignatura s'aprova si la nota final és igual o superior a cinc.

### AVALUACIÓ DE LES COMPETÈNCIES

Per a l'avaluació de les competències G-1, G-3, G-16, G-17, E-Q1, E-Q8, E-FM2, T-1M, T-2M, T-3M s'utilitzarà com a indicador la nota de l'assignatura.

### BIBLIOGRAFIA

- 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

\* Aquestes característiques no es poden modificar sense l'aprovació dels òrgans responsables de les estructures acadèmiques de nivell superior (matèria, mòdul i/o pla d'estudis).





## ASSIGNATURA: DISSENY MOLECULAR

**MATÈRIA:** Disseny Molecular

**MÒDUL:** Menció Disseny i producció de Fàrmacs

**ESTUDIS:** Grau en Farmàcia

pàgina9 de 9

## HISTÒRIC DEL DOCUMENT

### MODIFICACIONS ANTERIORS

Abril 2018, Dra. Ana Cuartero

Juliol 2018, Dr. Roger Estrada

Juliol 2019, Dr. Roger Estrada

Juny 2020, Dr. Roger Estrada

Juliol 2021, Dr. Roger Estrada

### ÚLTIMA REVISIÓ

Juny 2022, Dr. Roger Estrada

\* Aquestes característiques no es poden modificar sense l'aprovació dels òrgans responsables de les estructures acadèmiques de nivell superior (matèria, mòdul i/o pla d'estudis).