

	PROCESO PARA EL DESARROLLO DE LAS ENSEÑANZAS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEx		
	Curso académico: 2024-25	Código: P/CL009_FC_D002	

PLAN DOCENTE DE LA ASIGNATURA

Identificación y características de la asignatura			
Código	502701	Créditos ECTS	6
Denominación (español)	Diseño de Fármacos		
Denominación (inglés)	Drug Design		
Titulaciones	Biotecnología		
Centro	Facultad de Ciencias		
Semestre	6º y 8º	Carácter	Optativo
Módulo	Optativo		
Materia	Diseño de Fármacos		
Profesor/es			
Nombre	Despacho	Correo-e	Página web
Jaime María Merino Fernández	DBQ6	jmmerino@unex.es	
Área de conocimiento	Bioquímica y Biología Molecular		
Departamento	Bioquímica y Biología Molecular y Genética		
Pedro Cintas Moreno	Edificio de Química (planta baja)	pecintas@unex.es	
Área de conocimiento	Química Orgánica		
Departamento	Química Orgánica e Inorgánica		
Profesor coordinador (si hay más de uno)	Jaime María Merino Fernández		

Competencias
Competencias básicas
CB1 - Que los estudiantes hayan demostrado poseer y comprender conocimientos en un área de estudio que parte de la base de la educación secundaria general, y se suele encontrar a un nivel que, si bien se apoya en libros de texto avanzados, incluye también algunos aspectos que implican conocimientos procedentes de la vanguardia de su campo de estudio.
CB2: Que los estudiantes sepan aplicar sus conocimientos a su trabajo o vocación de una forma profesional y posean las competencias que suelen demostrarse por medio de la elaboración y defensa de argumentos y la resolución de problemas dentro de su área de estudio.
CB3: Que los estudiantes tengan la capacidad de reunir e interpretar datos relevantes (normalmente dentro de su área de estudio) para emitir juicios que incluyan una reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica o ética.
CB4: Que los estudiantes puedan transmitir información, ideas, problemas y soluciones a un público tanto especializado como no especializado.

	PROCESO PARA EL DESARROLLO DE LAS ENSEÑANZAS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEX		
	Curso académico: 2024-25	Código: P/CL009_FC_D002	

CB5: Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía.

Competencias generales

CG1 - Aptitud para seguir con aprovechamiento los cursos de posgrado que le faculten de manera específica en terrenos docentes, investigadores o profesionales.

CG2 - Capacidad para generar, adquirir y procesar, de manera autónoma, información relacionada con la Biotecnología.

CG3 - Capacidad para planificar, ejecutar y criticar procesos de conocimiento en el ámbito de su actividad.

CG4 - Capacidad para aplicar conocimientos de ciencias y tecnologías básicas a sistemas biológicos y sanitarios.

CG5 - Capacidad para identificar, formular y resolver problemas dentro de contextos amplios y multidisciplinares, mediante la integración de conocimientos y la participación en equipos multidisciplinares.

CG6 - Capacidad para analizar y valorar el impacto social y medioambiental de las soluciones técnicas, comprendiendo la responsabilidad ética y profesional en el ámbito de la Biotecnología.

CG7 - Capacidad para resolver problemas con iniciativa, toma de decisiones, autonomía y creatividad.

CG8 - Capacidad de trasladar el aprendizaje teórico a un contexto práctico.

CG9 - Capacidad de auto-evaluación para tomar conciencia de la necesidad de mantener actualizados los conocimientos, habilidades y actitudes mediante un proceso de formación continua

Competencias transversales

CT1 - Aplicar los conocimientos adquiridos en el título a su desempeño laboral de una forma profesional y rigurosa, así como desenvolverse con seguridad en un laboratorio.

CT2: Utilizar y aplicar tecnología de información y comunicación (TIC) en el ámbito formativo y profesional.

CT3: Poseer y comprender la información de libros de texto avanzados y acceder a conocimientos procedentes de la vanguardia del campo de estudio del título.

CT4: Desarrollar habilidades de aprendizaje, organización y planificación, necesarias tanto para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía, como para el desempeño profesional.

CT5: Interpretar, analizar y sintetizar datos e información relevante que permitan al alumno desarrollar ideas, resolver problemas y emitir un razonamiento crítico sobre temas importantes de índole social, científica o ética.

CT6: Transmitir de forma eficaz resultados y conclusiones a un público tanto especializado como no especializado.

CT7: Expresarse correctamente de forma escrita y oral en la lengua nativa, así como dominar suficientemente un idioma extranjero, preferentemente el inglés.

CT8: Liderar o trabajar en equipo adaptándose positivamente a diferentes contextos y situaciones.

CT9: Respetar los derechos fundamentales y de igualdad entre hombres y mujeres, así como adquirir un compromiso ético de respeto a la vida y al medio ambiente.

	PROCESO PARA EL DESARROLLO DE LAS ENSEÑANZAS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEX		
	Curso académico: 2024-25	Código: P/CL009_FC_D002	

Contenidos
Breve descripción del contenido
<p>Fuentes de fármacos: productos naturales (vegetal, animal, microbiano) y sintéticos. Búsqueda y optimización de compuestos modelo (prototipos). Metodologías semi-cuantitativas y cuantitativas (QSAR). Receptores. Curvas dosis-respuesta y estudio de la interacción fármaco-receptor. Agonistas y antagonistas: algunos ejemplos de relevancia terapéutica. Inhibición enzimática. Profármacos y sus aplicaciones. Antimetabolitos. Diseño de fármacos basados en química combinatorial y ensayos de alta eficacia (<i>high-throughput screening</i>). Diseño basado en la estructura de los ligandos. Diseño basado en la diana. Complejos fármaco-receptor. Estereoquímica y acción farmacológica: fármacos quirales. Resolución cinética basada en biocatálisis. Impacto de la biotecnología en el descubrimiento de fármacos. Bioconjugados. Tecnologías recombinantes. Tecnologías antisentido.</p>
Temario de la asignatura
<p>Denominación del tema 1: Introducción al descubrimiento y diseño de fármacos o drogas.</p> <p>Contenidos del Tema 1: Consideraciones históricas: medicina tradicional; Descubrimiento de fármacos sin un modelo; Descubrimiento de un modelo: Ensayos aleatorios y no aleatorios, Estudios metabólicos, Observaciones clínicas, Aproximaciones racionales al descubrimiento de un modelo. Etapas del desarrollo de un fármaco.</p>
<p>Denominación del tema 2: Desarrollo de fármacos: modificación del modelo.</p> <p>Contenidos del Tema 2: Identificación de la parte activa: el farmacóforo; Modificación de grupos funcionales; Relaciones estructura-actividad; Modificaciones estructurales: homologación, ramificación, transformaciones anillo-cadena, bioisosterismo; Relaciones estructura-actividad (SAR): parámetros fisicoquímicos: efectos electrónicos (la ecuación de Hammett), efectos lipofílicos (la ecuación de Hansch), efectos estéricos (la ecuación de Taft), correlaciones de los parámetros fisicoquímicos con la actividad biológica, Curvas dosis-respuesta. Características. Eficacia (E_{max}). Potencia (DE_{50}). Tolerancia. Desensibilización.</p> <p>Descripción de las actividades prácticas del tema 2: Los contenidos prácticos de este tema están relacionados con la tarea de la práctica de simulación bioinformática relacionada con la interacción fármaco-receptor.</p>
<p>Denominación del tema 3: Relaciones cuantitativas estructura química-actividad biológica (QSAR).</p> <p>Contenidos del Tema 3: Correlación de parámetros fisicoquímicos con actividad biológica. Análisis de Hansch. Método Free y Wilson. Árbol de decisión de Topliss y gráficos de Craig. Metodologías QSAR- 3D. Mapeo de receptores.</p> <p>Descripción de las actividades prácticas del tema 3: Los contenidos prácticos de este tema están relacionados con la tarea de la práctica de simulación bioinformática relacionada con la interacción fármaco-receptor.</p>

	PROCESO PARA EL DESARROLLO DE LAS ENSEÑANZAS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEx		
	Curso académico: 2024-25	Código: P/CL009_FC_D002	

Denominación del Tema 4: **Receptores como dianas de fármacos.**

Contenidos del Tema 4: Tipos de receptores. Tipos de acción farmacológica; dianas de la acción farmacológica. Identificación de principales dianas; agonistas y antagonistas. Teorías de la interacción fármaco-receptor. Interacciones involucradas en la complejación fármaco-receptor. Quiralidad y actividad biológica. Concentración, afinidad y actividad intrínseca.

Descripción de las actividades prácticas del tema 4: Los contenidos prácticos de este tema están relacionados con la tarea de la práctica de simulación bioinformática relacionada con la interacción fármaco-receptor.

Denominación del tema 5: **Sistemas de diseño combinatorial de productos químicos y escrutinio.**

Contenidos del Tema 5: Sistemas de Diseño Combinatorial y Escrutinio. Síntesis combinatoria en fase sólida. Codificación de quimiotecas. *High Throughput Screening*. Estrategias para la búsqueda de nuevos compuestos líderes (*leads compounds*). Aplicaciones.

Descripción de las actividades prácticas del tema 5: Los contenidos prácticos de este tema están relacionados con las tareas 1-4 de la práctica de laboratorio.

Denominación del tema 6: **Genómica y diseño de fármacos.**

Contenidos del Tema 6: Farmacogenómica. Genes responsables de enfermedad. Identificación de blancos terapéuticos moleculares. Aplicación en la industria farmacéutica. Selección de individuos para pruebas clínicas. Medicina personalizada.

Denominación del tema 7: **Metabolismo e inactivación de fármacos.**

Contenidos del Tema 7: Introducción. Métodos de estudio del metabolismo de fármacos. Caminos de desactivación y eliminación de fármacos: biotransformaciones oxidativas, reductivas e hidrolíticas. Reacciones de conjugación.

Denominación del tema 8: **Profármacos: diseño y aplicaciones.**

Contenidos del Tema 8: Concepto de profármaco. Tipos de profármacos. Mecanismo de activación de profármacos. Profármacos unidas a un transportador. ADEPT y GDEPT. Profármacos bioprecusores.

PROGRAMA DE SESIONES PRÁCTICAS EN LABORATORIO/SALA DE ORDENADORES

Práctica de laboratorio para estudiar el análisis de la capacidad protectora de moléculas obtenidas por química combinatorial frente a toxicidad mediada por dioxinas en cultivos de líneas celulares humanas. Esta práctica tendrá una duración de 15 h y se distribuirá en las siguientes tareas principales:

Tarea 1. Mantenimiento del cultivo de líneas celulares.

Tarea 2. Tratamientos con ligandos específicos.

Tarea 3. Ensayos de viabilidad celular.

Tarea 4. Análisis de resultados y discusión.

	PROCESO PARA EL DESARROLLO DE LAS ENSEÑANZAS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEx		
	Curso académico: 2024-25	Código: P/CL009_FC_D002	

Prácticas de simulación bioinformática relacionadas con la interacción fármaco-receptor.
Tarea 1: Simulaciones informáticas de interacciones fármaco-receptor

Actividades formativas								
Horas de trabajo del alumno/a por tema		Horas Gran grupo	Actividades prácticas				Actividad de seguimiento	No presencial
Tema	Total	GG	CH	L	O	S	TP	EP
Tema 1	13	5						8
Tema 2	23	6		3				14
Tema 3	22	6		4				12
Tema 4	26	6		4			1	15
Tema 5	18	4		4				10
Tema 6	15	5						10
Tema 7	16	6					1	9
Tema 8	15	5						10
Evaluación	2	2						
TOTAL	150	45		15			2	88

GG: Grupo Grande (85 estudiantes).

CH: prácticas clínicas hospitalarias (7 estudiantes).

L: prácticas laboratorio o campo (15 estudiantes).

O: prácticas sala ordenador o laboratorio de idiomas (20 estudiantes).

S: clases problemas o seminarios o casos prácticos (40 estudiantes).

TP: Tutorías Programadas (seguimiento docente, tipo tutorías ECTS).

EP: Estudio personal, trabajos individuales o en grupo, y lectura de bibliografía.

Metodologías docentes

1. Explicación y discusión de los contenidos.
2. Resolución, análisis y discusión de problemas.
3. Actividades experimentales como prácticas en laboratorios, aulas de informática y trabajos de campo.
4. Actividades de seguimiento individual o por grupos del aprendizaje.
5. Trabajo autónomo del alumno.

Resultados de aprendizaje

Adquirir conocimientos acerca de métodos para el diseño racional y optimización de compuestos modelo con actividad terapéutica. Estudiar otras aproximaciones en la

	PROCESO PARA EL DESARROLLO DE LAS ENSEÑANZAS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEX		
	Curso académico: 2024-25	Código: P/CL009_FC_D002	

preparación de nuevos fármacos (química combinatorial, diseño asistido por computación y biocatálisis). Reconocer la importancia de fármacos de origen biotecnológico así como las estrategias genómico-químicas.

Sistemas de evaluación

CRITERIOS DE EVALUACIÓN

Se valorarán positivamente los siguientes aspectos: los conocimientos teóricos adquiridos y la destreza y actitud en la realización de actividades prácticas; la asistencia y la participación y motivación del alumno en clase; su implicación en la discusión del contenido de los temas objeto de estudio; el interés en la preparación y presentación de seminarios.

INSTRUMENTOS DE EVALUACIÓN

La evaluación continua de la asignatura comprende la realización y cumplimiento de las siguientes actividades:

- Prueba escrita de cuestiones tipo test (opción verdadero/falso o de elección múltiple) así como cuestiones de desarrollo teórico-práctico sobre todos los temas impartidos, con objeto de evaluar la comprensión de los mismos. La nota de estas dos pruebas supondrá el 90% de la calificación final.
- De forma alternativa, y con objeto de fomentar la evaluación continua, podrán realizarse exámenes parciales eliminatorios de los contenidos impartidos, que incluirán el mismo tipo de cuestiones descritas anteriormente (cuestiones tipo test y/o cuestiones de desarrollo).
- La realización de las prácticas de laboratorio así como un informe y/o cuestiones sobre las mismas constituirá el 10% de la nota final.
- Se evaluará el planteamiento correcto y la capacidad de análisis y/o síntesis, según proceda, así como una presentación clara y ordenada.

Convocatorias extraordinarias: se evaluará de manera exclusiva mediante un examen teórico.

La realización de las prácticas de laboratorio se considera una actividad no recuperable dentro del curso académico, dado que se dispone de un espacio físico en un horario que necesita coordinarse con otras asignaturas del área y/o del grado. Debido a las características intrínsecas de esta actividad el alumno deberá haberlas realizado previamente.

De acuerdo con la Normativa de Evaluación de los Resultados de Aprendizaje y de las Competencias Adquiridas (Art. 4.6), *cualquier alumno podrá aprobar la asignatura superando la prueba del examen final* que incluirá, como se ha expuesto anteriormente, cuestiones de teoría, seminario bibliográfico y prácticas de laboratorio. Esta prueba garantiza una evaluación completa de las competencias.

Para aprobar la asignatura será necesario obtener un mínimo de 5 puntos sobre 10.

La elección de la modalidad de evaluación global corresponde a los estudiantes, que podrán llevarla a cabo durante el primer cuarto del semestre (o hasta el último día del periodo de ampliación de matrícula si éste acaba después de ese periodo), a través de un espacio específico creado para ello en el Campus Virtual. En caso de ausencia de solicitud expresa por

	PROCESO PARA EL DESARROLLO DE LAS ENSEÑANZAS DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE LA UEx		
	Curso académico: 2024-25	Código: P/CL009_FC_D002	

parte del estudiante, la modalidad asignada será la de evaluación continua. La evaluación en este caso será con una prueba escrita tal y como se indicado más arriba que supondrá el 100% de la calificación final.

Bibliografía (básica y complementaria)

BIBLIOGRAFÍA

- R. B. Silverman, M. B. Halladay, "The Organic Chemistry of Drug Action and Drug Design", 3rd ed., 2014, Elsevier.
- D. J. A. Crommelin, R. D. Sindelar, B. Meibohm (Eds.), "Pharmaceutical Biotechnology. Fundamentals and Applications", 4th ed., 2013, Springer.
- J. A. Galbis Pérez, "Panorama Actual de la Química Farmacéutica", 2000, Servicio de Publicaciones de la Universidad de Sevilla.
- C. Avendaño, "Introducción a la Química Farmacéutica", 2001, Interamericana-McGraw-Hill.
- E. Raviña Rubira, "Medicamentos. Un viaje a lo largo de la evolución histórica del descubrimiento de fármacos", 2008, Servicio de Publicaciones de la Universidad de Santiago de Compostela.
- J. Flórez, "Farmacología Humana", 6ª ed., 2013, Elsevier.

La bibliografía más actual sobre la temática de la asignatura puede encontrarse en publicaciones científicas periódicas tales como *Nature Reviews Drug Discovery* o *Nature Biotechnology*. Una visión actualizada bibliográfica se puede consultar en <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed>

Otros recursos y materiales docentes complementarios

RECURSOS ON-LINE

<http://www.sebbm.bq.ub.es/>

<http://www.vademecum.es/>

<http://www.aemps.gob.es/> (Agencia Española de Medicamentos y Productos sanitarios)

EQUIPAMIENTO DE LABORATORIO

Equipamiento para electroforesis y *western immunoblotting*.

Equipos de espectroscopía UV-VIS.

Equipamiento para preparación y mantenimiento de cultivos celulares.

Centrifuga, agitadores, baños termostáticos.