



CEU



UNIVERSIDAD COMPLUTENSE  
MADRID



Universidad  
de Alcalá

# GUÍA DOCENTE

## DISEÑO DE FÁRMACOS

Máster Interuniversitario en  
DESCUBRIMIENTO DE FÁRMACOS

---

Curso Académico 2024/25

## I.- IDENTIFICACIÓN

NOMBRE DE LA MATERIA: Diseño de Fármacos

CARÁCTER: Obligatoria

MÓDULO: Química Médica y Diseño de Fármacos

SEMESTRE: Primero

CRÉDITOS: 6 ECTS

DEPARTAMENTOS:

Química y Bioquímica, Facultad de Farmacia, Universidad San Pablo CEU

PROFESOR/ES RESPONSABLE/S:

Coordinador:

Prof<sup>a</sup> Dra. Dña Beatriz de Pascual-Teresa (USP-CEU),  
Catedrática  
e-mail: [bpaster@ceu.es](mailto:bpaster@ceu.es)

Profesores:

Prof<sup>a</sup> Dra. Dña. Claire Coderch Boué (USP-CEU), Titular  
e-mail: [claire.coderchboue@ceu.es](mailto:claire.coderchboue@ceu.es)

Prof<sup>a</sup> Dra. Dña. Sonsoles Martín Santamaría (CIB-CSIC)  
Científico Titular

e-mail: [smsantamaria@cib.csic.es](mailto:smsantamaria@cib.csic.es)

Prof<sup>a</sup> Dra. Dña. Irene Ortín Remón (USP-CEU), Adjunta  
e-mail: [irene.ortinremon@ceu.es](mailto:irene.ortinremon@ceu.es)

Prof. Dr. D. José María Zapico Rodríguez (USP-CEU), Adjunto  
e-mail: [josemaria.zapicorodriguez@ceu.es](mailto:josemaria.zapicorodriguez@ceu.es)

## II.- OBJETIVOS

La asignatura de Diseño de Fármacos tiene como principal objetivo el estudio de las principales metodologías computacionales utilizadas en el diseño racional de fármacos. Incluye una parte teórica donde se exponen las bases de los métodos utilizados y una parte práctica muy extensa, en laboratorios de informática donde se aplican estas técnicas para la resolución y simulación de problemas prácticos concretos.

## III.- CONOCIMIENTOS PREVIOS Y RECOMENDACIONES

No se establecen requisitos previos.

RECOMENDACIONES:

Se recomienda tener conocimientos de Química Orgánica y Química Médica.

## IV.- CONTENIDOS

BREVE DESCRIPCIÓN DE LOS CONTENIDOS:

En esta asignatura se estudian las diferentes metodologías computacionales

utilizadas en el diseño racional de fármacos. Se abordarán desde el punto de vista teórico y práctico los siguientes aspectos y métodos: Relación estructura-actividad. Propiedades de los productos drug-like y predicción de afinidad/actividad. Química Computacional. Mecánica molecular. Métodos semiempíricos. Métodos *ab initio*. Cálculos DFT. Análisis conformacional. Dinámica molecular. Simulaciones QM/MM. Diseño de fármacos basado en la estructura. Diseño de fármacos basado en el ligando. QSAR-3D. Identificación de farmacóforos. Modelado de proteínas. Predicción de estructura (swissmodel y alfafold). Docking. Screening virtual. Diseño de novo.

## V.- BIBLIOGRAFÍA

### Bibliografía Básica

- David C. Young. Computational Drug Design. A Guide for Computational and Medicinal Chemists. John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, NJ. 2009.
- Andrew R. Leach, Molecular Modelling, Principles and Applications, 2nd Edition, Pearson, Prentice Hall, 2001.
- Grant, G.H.; Richards, W.G.; Computational Chemistry. Oxford University Press, 1996.
- Wade, R. drug Molecular Modeling in Drug Design, Mdpi AG, 2019
- Poongavanam,V.; Ramaswamy, V. Computational Drug Discovery: Methods and Applications. Wiley. 2024.

### Bibliografía Complementaria

- J. Naidoo, John Brady, Martin J. Field, Jiali Gao, and Michael Hann. Modelling Molecular Structure and Reactivity in Biological Systems. Royal Society of Chemistry Cambridge. 2006
- A. Zewail. Physical Biology: From Atoms to Medicine. Imperial College Press. 2008.
- S. L. Schreiber, T. M. Kapoor, G. Wess. Chemical Biology: From Small Molecules to Systems Biology and Drug Design. Wiley. 2007.

## VI.- COMPETENCIAS

### BÁSICAS Y GENERALES

CB06- 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, en el campo del Descubrimiento de Fármacos.

CB07- 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 el Descubrimiento de Fármacos.

CB08- Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios.

CB09- 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.

CB10- 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.

CG1- Conocer y utilizar las Tecnologías de la Información y la Comunicación aplicadas al Descubrimiento de Fármacos.

CG2- Conocer y aplicar la normativa y regulación local, autonómica, nacional e internacional en el ámbito del Descubrimiento de Fármacos.

CG3- Comprender y ser capaz de aplicar las herramientas básicas de investigación en el ámbito del Descubrimiento de Fármacos.

CG4- Comprender, analizar y evaluar teorías, resultados y desarrollos en el idioma de referencia, además de en la lengua materna, en el ámbito del Descubrimiento de Fármacos.

CG5- Poseer conocimientos racionales y críticos en el estudio del Descubrimiento de Fármacos.

CG6- Conocer los métodos, técnicas e instrumentos de análisis para el estudio del Descubrimiento de Fármacos.

CG7. Capacidad para encontrar soluciones alternativas en el planteamiento de un problema o en la utilización del Descubrimiento de Fármacos.

CG8- Conocer los fundamentos y las implicaciones económicas de los procesos de producción y aplicación del Descubrimiento de Fármacos.

CG9- Resolver casos prácticos conforme al Descubrimiento de Fármacos, lo que implica la elaboración previa de material, la identificación de cuestiones problemáticas, la selección, interpretación y la exposición argumentada del Descubrimiento de Fármacos.

#### COMPETENCIAS ESPECÍFICAS.

CE01. Comprensión sistemática del campo de estudio del Descubrimiento de Fármacos y el dominio de las habilidades y métodos de investigación relacionados con dicho campo.

CE02- Capacidad de realizar un análisis crítico, evaluación y síntesis de ideas nuevas y complejas en Descubrimiento de Fármacos.

CE04. Conocimiento de las bases químicas teóricas para el diseño racional de fármacos mediante la utilización de técnicas computacionales y capacidad de seleccionar las metodologías adecuadas en función del sistema objeto de estudio.

## VII.- RESULTADOS DEL APRENDIZAJE

1. Capacidad de manejar las bases químicas teóricas para el diseño racional de fármacos mediante la utilización de técnicas computacionales.
2. Capacidad de seleccionar las diferentes técnicas y metodologías empleadas más frecuentemente en el diseño de fármacos, dependiendo del sistema objeto de estudio.
3. Capacidad de aplicar los conocimientos teóricos a la resolución de ejemplos prácticos de diseño de fármacos asistido por ordenador.

## VIII.- HORAS DE TRABAJO POR ACTIVIDAD FORMATIVA

<b>Actividades formativas</b>	<b>Metodología</b>	<b>Horas</b>	<b>ECTS</b>	<b>Relación con las competencias</b>
Clase magistral	Lecciones expositivas con sistemas audiovisuales	20	2	Competencias: CE1, CE04
Clases prácticas y talleres	Laboratorio de ordenadores	25	2.5	Competencias: CE01, CE02, CE04
Actividades académicas dirigidas	Lectura crítica de publicaciones científicas	10	1	Competencias: CE01, CE02, CE04
Examen	Presentación de trabajos y exámenes	5	0.5	Competencias: CE01, CE02, CE04

## IX.- METODOLOGÍA

*Las clases magistrales* se impartirán al grupo completo de alumnos y consistirán en conferencias por profesores internos y externos, por profesionales de la industria o la administración tanto nacionales como extranjeros.

*Las prácticas y talleres* se llevarán a cabo en laboratorios de ordenadores y consistirán en ejercicios y simulaciones utilizando el software adecuado en cada situación.

Como complemento al trabajo personal realizado por el alumno, y para potenciar el desarrollo del trabajo en grupo, se podrá proponer como actividad dirigida la *elaboración y presentación de un trabajo* sobre los contenidos de la asignatura. Todo ello permitirá que el alumno ponga en práctica sus habilidades en la obtención de información y le permitirá desarrollar habilidades relacionadas con las tecnologías de la información.

Estarán disponibles tutorías para alumnos que de manera individual deseen resolver las dudas que surjan durante el estudio. Estas tutorías se realizarán de forma presencial en los horarios indicados por cada profesor.

Se utilizará el *Campus Virtual* o la página web del Máster para permitir una comunicación fluida entre profesores y alumnos y como instrumento para poner a disposición de los alumnos el material que se utilizará en las clases tanto teóricas como prácticas y talleres.

## **X.- EVALUACIÓN**

La asistencia a las actividades presenciales es obligatoria. Se requiere una asistencia mínima del 80% de estas actividades para que el alumno sea evaluado.

Para la evaluación del alumno se tendrá en cuenta la presentación de la comunicación realizada y su participación activa en todas las actividades docentes, así como el examen de la asignatura.

Para superar la asignatura será necesario haber realizado las prácticas de laboratorio de ordenadores.

La calificación se llevará a cabo según el siguiente baremo:

1. Examen escrito (60%)
  - a. La nota mínima del examen escrito para aplicar los porcentajes es de 5,0 sobre 10.
  - b. En el caso de que el estudiante no haya superado la nota mínima del examen tendrá que presentarse en la convocatoria extraordinaria a un examen que deberá superar con una nota mínima de 5,0 sobre 10 para poder aprobar la asignatura.
2. Prácticas de laboratorio, seminarios y trabajos (40%).
  - a. Las prácticas de laboratorio se aprueban con una nota media de 5 sobre 10.
  - b. Todos los trabajos de prácticas requeridos a los alumnos deberán ser entregados para poder hacer la media.
  - c. En el caso de que el estudiante no haya superado la nota mínima de las prácticas de laboratorio o tenga prácticas por entregar, tendrá que presentar aquellas que estén suspensas o no presentadas en la convocatoria extraordinaria y deberá obtener una nota mínima de 5,0 sobre 10 de media para poder aprobar la asignatura.