



CEU



UNIVERSIDAD COMPLUTENSE  
MADRID



Universidad  
de Alcalá

# GUÍA DOCENTE

## METODOLOGÍAS PARA LA DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL DE FÁRMACOS Y EL ESTUDIO DE FENÓMENOS DE RECONOCIMIENTO MOLECULAR

### Máster Interuniversitario en DESCUBRIMIENTO DE FÁRMACOS

---

Curso Académico 2024/25

## I.- IDENTIFICACIÓN

NOMBRE DE LA MATERIA: Metodologías para la determinación estructural de fármacos y el estudio de fenómenos de reconocimiento molecular

CARÁCTER: Optativa

MÓDULO: Síntesis y caracterización de fármacos

SEMESTRE: Segundo

CRÉDITOS: 6 ECTS

DEPARTAMENTOS:

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

PROFESORES RESPONSABLES:

Coordinadores:

Dr. D. Javier Pérez Castells (USP-CEU), Catedrático

e-mail: [jpercas@ceu.es](mailto:jpercas@ceu.es)

Dr. F. Javier Cañada Vicinay (CIB-CSIC), Profesor de Investigación

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

Profesores:

Dra Dña. Gema Domínguez Martín (USP-CEU), Catedrática

e-mail: [gdommar@ceu.es](mailto:gdommar@ceu.es)

Dr. D. Angel Manu Martínez Garzón (USP-CEU), P. Col.

e-mail: [angel.martinezgarzon@ceu.es](mailto:angel.martinezgarzon@ceu.es)

Dr. D. José María Zapico Rodríguez (USP-CEU), P.Adjunto

e-mail: [josemaria.zapicorodriguez@ceu.es](mailto:josemaria.zapicorodriguez@ceu.es)

Dra. Angeles Canales Mayordomo (UCM), P. Titular

e-mail: [ma.canales@quim.ucm.es](mailto:ma.canales@quim.ucm.es)

Dra. Dña. Sonsoles Martín Santamaría (CIB-CSIC), Científico Titular

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

Dra. Dña. Irene Ortín Remón (USP-CEU), P. Adjunta

e-mail: [irene.ortinremon@ceu.es](mailto:irene.ortinremon@ceu.es)

## II.- OBJETIVOS

La asignatura de Metodologías para la determinación estructural de fármacos y el estudio de fenómenos de reconocimiento molecular tiene dos objetivos principales asociados a sus dos partes:

1. Formar al alumno en las técnicas espectroscópicas más importantes utilizadas en elucidación estructural de fármacos con gran énfasis en la RMN.
2. Suministrar al alumno formación sobre los avances en procesos de reconocimiento molecular, fundamentales para la interacción fármaco receptor, estudiados por técnicas de RMN.

### III.- CONOCIMIENTOS PREVIOS Y RECOMENDACIONES

No se establecen requisitos previos.

### IV.- CONTENIDOS

#### 1. Determinación estructural de fármacos

Determinación estructural de fármacos: RMN. Una perspectiva histórica. Desplazamientos químicos. Aspectos prácticos sobre preparación de muestras y partes de un equipo de RMN. Constantes de Acoplamiento. Escalas de tiempo en RMN. RMN bidimensional. Conceptos básicos. Correlación Homonuclear. COSY, TOCSY y análogos. El efecto NOE. RMN en elucidación estructural de moléculas de interés en química farmacéutica: Productos Naturales. Oligosacáridos y ácidos nucleicos. Péptidos y Proteínas. Correlación Heteronuclear. HMQC, HSQC, HMBC y análogos. RMN en Química farmacéutica y diseño de fármacos. Generalidades. Aproximaciones basadas en el ligando: STD, waterlogsy y análogos. Aproximaciones basadas en el receptor: Perturbaciones de desplazamiento químico. SAR by NMR. El método shapes. Diseño basado en fragmentos.

#### 2. Reconocimiento molecular.

Reconocimiento Molecular. Aspectos básicos. Carbohidratos: generalidades e interacciones. Proteínas intrínsecamente desordenadas: Interacciones. Docking: Validando teoría y experimento. Glicomiméticos. Ultracentrifugación analítica. Microscopía electrónica. Reconocimiento molecular en sistemas modelo. Venciendo las resistencias a antitumorales. Herramientas de evaluación y optimización de la interacción entre los antitumorales y su diana. Plegamiento de Proteínas. Interacciones carbohidrato-proteína. Interacciones enzima-sustrato: Glicosidasas. Reconocimiento de glicosaminoglicanos. Interacciones CH- $\pi$ .

## V.- BIBLIOGRAFÍA

1. Claridge, T. D. W. High Resolution NMR Techniques in Organic Chemistry, 2<sup>nd</sup>. Ed 2009, Elsevier.
2. Jacobsen, N. E. NMR spectroscopy explained. 2007 Wiley.
3. Keeler, J. Understanding NMR spectroscopy. 2009 Wiley
4. Oliver Zerbe Ed., "BioNMR in Drug Design" Wiley-VCH, Weinheim 2003
5. J. Jimenez-Barbero, T. Peters Eds. "NMR Spectroscopy of Glycoconjugates" Wiley-VCH, Weinheim 2002
6. Kurt Wüthrich Ed. "NMR of Proteins and Nucleic Acids" John Wiley & Sons, N. York, 1986
7. NMR Trends in Drug Discovery: NMR Screening. CURRENT TOPICS IN MEDICINAL CHEMISTRY, VOL 3, FASC 1, 2003.
8. S. W. Homans, "NMR Spectroscopy Tools for Structure-Aided Drug Design" *Angew. Chem. Int. Ed.* 2004, 43, 29 –300
9. B. Meyer y T. Peters "NMR Spectroscopy Techniques for Screening and Identifying Ligand Binding to Protein Receptors", *Angew. Chem. Int. Ed.* 2003, 42, 864 – 890
10. "B. J. Stockman, C. Dalvit, NMR screening techniques in drug discovery and drug design" *Prog. NMR Spec.* 2002, 41 187–231

## 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.

CE06. Capacidad de utilizar experimentos de resonancia magnética nuclear y espectrometría de masas para la determinación estructural de fármacos y para el estudio de fenómenos de reconocimiento molecular entre fármacos y sus receptores.

## VII.- RESULTADOS DEL APRENDIZAJE

1. Capacidad de seleccionar las técnicas y procedimientos apropiados en la determinación estructural de fármacos sobre la base del conocimiento de los fundamentos físicos de las técnicas espectroscópicas más habituales.
2. Capacidad de interpretar espectros complejos de RMN.
3. Conocimiento de los avances en procesos de reconocimiento molecular, fundamentales para la interacción fármaco-receptor.
4. Capacidad de estudiar la interacción fármaco-receptor por técnicas de RMN.

## 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	30	3	Competencias: CE01, CE02
Clases prácticas	Visitas a laboratorios de investigación. Prácticas en los equipos de RMN.	20	2	Competencias: CE01, CE02, CE06
Actividades académicas dirigidas	Trabajo en grupo con espectros.	8	0.8	Competencias: CE01, CE02, CE06
Examen	Examen.	2	0.2	Competencias: CE01, CE02, CE06

## IX.- METODOLOGÍA

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

*Los seminarios y clases prácticas* se realizarán en los laboratorios de RMN correspondientes en los que los alumnos manejarán los equipos

Los alumnos realizarán varios talleres en pequeños grupos para elucidar espectros.

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 de problemas.

## **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. La asistencia a talleres es obligatoria.

Para la evaluación del alumno se tendrá en cuenta la presentación de los talleres realizados y la participación activa del alumno en todas las actividades docentes así como el examen de la asignatura.

*Sistemas de evaluación:*

E1. Examen escrito sobre los contenidos expuestos: 60%. (nota mínima de 4.0 para poder superar la asignatura si la media ponderada con las exposiciones y talleres del alumno alcanza el 5.0)

E2. Participación y elaboración de las Actividades Académicas Dirigidas (exposiciones y talleres del alumno): 40%

*Sistema de calificación:* Según la legislación vigente (numérico absoluto, sobre 10)