

<p style="text-align: center;"><b>MÀSTER OFICIAL EN RECERCA, DESENVOLUPAMENT I CONTROL DE MEDICAMENTS 2006-2007</b></p>
---

## **1. DADES DE L'ASSIGNATURA**

**Nom de l'assignatura:** **BIOINFORMÀTICA I DISSENY DE FÀRMACS**

**Tipus (obligatòria o optativa):** Optativa

**Nº ECTS:** 2,5

**Coordinador/s:** Ramón Pouplana

**Departament/s:** Físicoquímica

**Professors:** Javier Luque i Ramón Pouplana

## **2. OBJECTIUS I METODOLOGIA:**

### **Objectius:**

Donar a l'alumne una visió global de les tècniques emprades en modelització molecular i fomentar l'aplicació d'aquestes tècniques a l'estudi de sistemes bioquímics i farmacològics.

### **Classes magistrals\* (descripció del contingut i hores aproximades):**

1.-Relacions estructura-activitat. SAR i QSAR.(2h). Fonaments bàsics de Modelització molecular (1h).

2.-Fonaments bàsics dels mètodes de mecànica quàntica i funcional de densitat. (3h).

3.-Propietats moleculars: geomètriques i electròniques (2h).

4.-Fonaments bàsics dels mètodes de mecànica molecular. Camps de força. Mètodes de minimització. Dinàmica Molecular. Mètodes de Montecarlo (3h).

5.-Mètodes de solvatació. Mètodes de predicció de mode d'unió lligand-receptor (2h).

6.-Mètodes indirectes de predicció de la unió lligand-receptor. 3D-QSAR. Farmacòfor. COMFA. Predicció ADME. (2h).

---

\* Equivalència d'assignatura de 5 ECTS (obligatòria): fins a 150 h de treball d'estudiant, d'aquestes 1/3 (50 h) són de presencialitat i d'aquestes un 60 % (fins a 30 h) seran de "pissarra" i un 40 % (fins a 20 h) d'altres activitats presencials.

Equivalència d'assignatura de 2,5 ECTS (optativa) : fins a 75 h de treball d'estudiant, d'aquestes 1/3 (25 h) són de presencialitat i d'aquestes un 60 % (fins a 15 h) seran de "pissarra" i un 40 % (fins a 10 h) d'altres activitats presencials.

**Altres activitats presencials o no presencials\* (descripció i hores de cada modalitat):**

Analitzar i valorar les potencials aplicacions de les tècniques descrites, a partir de treballs de recerca publicats.

Treballs pràctics d'aplicació de certes tècniques de modelització molecular.

**3. FONTS D'INFORMACIÓ:**

A.R. Leach. Molecular Modeling. Principles and Applications. 2<sup>a</sup> ed. Pearso. Essex, 2001.

Química Teòrica y Computacional. J. Andrés y J. Bertrán (eds) Ed. Universitat Jaume I Castelló de la Plana, 2000

**4. AVALUACIÓ:**

Consistirà en una exposició oral analitzant i comentant un treball de recerca relacionat amb la temàtica de l'assignatura.