

<p style="text-align: center;">MÁSTER OFICIAL EN INVESTIGACIÓN, DESARROLLO Y CONTROL DE MEDICAMENTOS 2006-2007</p>

1. DATOS DE LA ASIGNATURA

Nombre de la asignatura: **BIOINFORMÁTICA Y DISEÑO DE FÁRMACOS**

Tipo (obligatoria u optativa): Optativa

Nº ECTS: 2,5

Coordinador: Ramón Pouplana

Departamento: Físicoquímica

Profesores: Javier Luque Garriga y Ramón Pouplana Solé

2. OBJETIVOS Y METODOLOGÍA:

Objetivos:

Dar al alumno una visión global de las técnicas utilizadas en modelización molecular y fomentar la aplicación de dichas técnicas al estudio de sistemas bioquímicos y farmacológicos.

Clases magistrales* (descripción del contenido y horas aproximadas):

1.-Relaciones estructura-actividad. SAR y QSAR.(2h). Fundamentos básicos de Modelización molecular (1h).

2.- Fundamentos básicos de los métodos de mecánica cuántica y funcional de densidad. (3h).

3.-Propiedades moleculares: geométricas y electrónicas (2h).

4.- Fundamentos básicos de los métodos de mecánica molecular. Campos de fuerza. Métodos de minimización. Dinámica Molecular. Métodos de Montecarlo (3h).

5.-Métodos de solvatación. Métodos de predicción de modo de unión ligando-receptor (2h).

6.- Métodos indirectos de predicción de la unión ligando-receptor. 3D-QSAR. Farmacóforo. COMFA. Predicción ADME. (2h).

* Equivalencia de asignatura de 5 ECTS (obligatoria): hasta 150 h de trabajo del estudiante, de las cuales 1/3 (50 h) son presenciales y de estas un 60 % (hasta 30 h) magistrales y un 40 % (hasta 20 h) de otras actividades presenciales.

Equivalencia de asignatura de 2,5 ECTS (optativa): hasta 75 h de trabajo del estudiante, de las cuales 1/3 (25 h) son presenciales y de estas un 60 % (hasta 15 h) magistrales y un 40 % (hasta 10 h) de otras actividades presenciales.

Otras actividades presenciales o no presenciales* (descripción y horas de cada modalidad):

Analizar y valorar las potenciales aplicaciones de las técnicas descritas, a partir de trabajos de investigación publicados.

Trabajos prácticos de aplicación de ciertas técnicas de modelización molecular.

3. FUENTES DE INFORMACIÓN:

A.R. Leach. Molecular Modeling. Principles and Applications. 2ª ed. Pearson. Essex, 2001.

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

4. EVALUACIÓN:

Consistirá en una exposición oral, analizando y comentando un trabajo de investigación relacionado con la temática de la asignatura.