

**Diseño y desarrollo avanzados de fármacos. Un enfoque integral de la investigación tradicional al diseño asistido por ordenador**  
**Cód. A04**

**DIRECCIÓN:**

Giorgio Giorgi Poletti y Míriam Ruiz Serrano.

**ÁREA EN LA QUE SE INSCRIBE EL CURSO:**

Salud.

**HORARIO DEL CURSO:**

Mañanas de 9:00 a 14:00 horas, de lunes a viernes.

**NÚMERO DE ALUMNOS:**

40.

**PERFIL DEL ALUMNADO:**

Dirigido a estudiantes y profesionales del ámbito del área de Ciencias de la Salud o Ciencias Experimentales, así como a otros profesionales o estudiantes con interés en entender las bases del diseño de fármacos. El alumnado tendrá que tener buenos conocimientos de inglés puesto que parte de las clases se impartirán en este idioma.

**OBJETIVOS:**

- Implementar estrategias teórico-prácticas que permitan al estudiante adquirir destrezas y habilidades en el ámbito del curso, alineados con los estándares europeos.
- Capacitar al estudiante en las metodologías para el descubrimiento y desarrollo de fármacos, tanto asistidas por ordenador como utilizando enfoques tradicionales.
- Motivar a los estudiantes a continuar sus estudios de máster y doctorado en universidades españolas en especialidades de Química Farmacéutica o áreas afines.
- Mejorar el conocimiento de los fármacos y su diseño entre el alumnado de las facultades que imparten grados en el Área de Ciencias de la Salud y Ciencias Experimentales, para que comprendan en profundidad las metodologías más apropiadas en el diseño de fármacos basado en el ligando y en la estructura para modular tanto el perfil farmacodinámico, como el perfil farmacocinético de los compuestos biológicamente activos.

**PROGRAMA:**

- **Descubrimiento, diseño y desarrollo de fármacos tradicional.**
  - Clases magistrales:

- Generalidades: definición de fármaco y nomenclatura.
- El fármaco: desde el descubrimiento hasta la farmacovigilancia.
- El diseño racional de fármacos: SAR.
- El diseño racional de fármacos: 1D y 2D-QSAR.
- El diseño de profármacos.
- Metabolismo y toxicidad.
- Actividades prácticas:
  - Seminario: El caso del rofecoxib.
- **Conceptos avanzados de farmacocinética y farmacodinamia.**
  - Clases magistrales:
    - Farmacodinamia.
    - Farmacocinética.
  - Actividades prácticas/Evaluaciones/ Tutorías:
    - Prácticas computacionales de farmacocinética.
    - Tutorías.
    - Evaluación continua mediante prueba escrita.
- **El diseño de fármacos asistido por ordenador.**
  - Clases magistrales:
    - Modelo Farmacofórico.
    - 3D-QSAR (CoMFA).
    - Método Combine.
    - ML/AI.
    - Docking.
  - Actividades prácticas:
    - Prácticas de ordenador del modelo Farmacofórico.
    - Prácticas de ordenador de 3D-QSAR (CoMFA).
    - Prácticas de ordenador del Método Combine.
    - Prácticas de ordenador ML/AI.
    - Prácticas de ordenador de Docking.
    - Tutorías/ Evaluación: tutorías y evaluación continua mediante prueba escrita.

### **ACTIVIDADES PRÁCTICAS:**

- Las actividades prácticas complementan y afianzan el contenido teórico de las clases magistrales. Este curso incluye sesiones orientadas al diseño de fármacos asistido por ordenador y a la modelización avanzada en farmacocinética.
- Con respecto a la parte sobre el diseño de fármacos asistido por ordenador, las prácticas se centran en el análisis de herramientas computacionales fundamentales en el desarrollo de nuevas entidades moleculares con actividad biológica. Se utilizará:
  - Modelo Farmacofórico: para identificar y caracterizar patrones espaciales críticos en la interacción fármaco-diana.
  - Análisis CoMFA (Comparative Molecular Field Analysis): destinado a explorar relaciones cuantitativas entre estructura química y actividad biológica.
  - Experimentos de Docking: utilizados para predecir la unión de ligandos a proteínas, permitiendo la evaluación de la afinidad y la especificidad de la interacción.
  - Metodología COMBINE: para integrar datos moleculares y energéticos en

el desarrollo de modelos predictivos robustos.

- Técnicas de Machine Learning e Inteligencia Artificial en el diseño de fármacos.
- Proyecto final: evaluación y seguimiento del proyecto final presentado de forma grupal por los estudiantes.

**PROFESORADO:**

- Giorgio Giorgi Poletti, UCM.
- Míriam Ruiz Serrano, UCM.
- Rino Ragno, Università di Roma "La Sapienza".
- Franco Lombardo, Universidad de Minnesota.
- Alessio Ragno, Instituto Nacional de Ciencias Aplicadas (INSA).