

## **FICHA DE ASIGNATURA**

**Título:** Bioinformática farmacológica.

**Descripción:** En la asignatura de Bioinformática farmacológica nos centramos en el uso de las herramientas más utilizadas en bioinformática para química computacional y dinámica molecular. A continuación, nos enfocaremos en farmacología, utilizando las principales herramientas bioinformáticas para las simulaciones de uniones a dianas moleculares, la generación de farmacóforos y las técnicas de acoplamiento molecular (docking).

**Carácter:** Obligatorio

**Créditos ECTS:** 6

**Contextualización:** Esta asignatura conforma la materia del Máster Bioinformática farmacológica. Se trata del tercer campo que trataremos en mayor profundidad en el Máster después de la Bioinformática genómica y la Bioinformática estructural. Estas tres materias permitirán a los estudiantes comprender tres de las áreas más utilizadas y demandadas en la bioinformática actualmente.

**Modalidad:** Online

**Temario:** Los contenidos que trataremos en la asignatura son:

- Química computacional: Uso de la herramienta de química computacional de software libre VMD.
- Dinámica molecular: Uso de la herramienta de dinámica molecular de software libre GROMACS.
- Farmacología:
- Aplicaciones de la dinámica molecular al diseño de fármacos: simulaciones de unión agonistas y antagonistas de dianas terapéuticas mediante la herramienta de software GROMACS.
- Generación de farmacóforos basados en el ligando: Uso de la herramienta de modelaje de farmacóforo basada en estructura, LigandScout.
- Acoplamiento molecular (Docking): Introducción a la herramienta de acoplamiento molecular de software libre HADDOCK.

### **Competencias:**

Competencias específicas

CE10: Evaluar los resultados de los análisis bioestadísticos de datos ómicos.

CE11: Analizar los principales formatos de secuencias en la aplicación de datos ómicos.

CE12: Extraer la información necesaria de las principales bases de datos de depósito de información biológica en la resolución de problemas.

CE27: Conocer los fundamentos de los métodos de la química computacional y la dinámica molecular.

CE28: Aplicar las técnicas de "docking" en bioinformática farmacológica.

CE29: Evaluar simulaciones en la administración, distribución, metabolismo y excreción (ADME) de fármacos en un contexto bioinformático.

### Actividades Formativas:

Actividad Formativa	Horas	Presencialidad
Clases expositivas	12	0%
Clases prácticas (Estudio de casos, resolución de problemas)	12	0%
Tutorías	10	0%
Trabajo autónomo	114	0%
Prueba final	2	100%

### Metodologías docentes:

Metodologías docentes	
Lección magistral	El profesor expone los contenidos de la asignatura sin intervención del estudiante.
Estudio de casos	El profesor facilita al estudiante herramientas para facilitar el aprendizaje activo y que este adquiera las competencias asignadas a la materia.
Resolución de problemas	La finalidad de esta metodología es favorecer la consecución de un grado elevado de autonomía intelectual mediante un planteamiento concreto formulado por el profesor.

### Sistema de Evaluación:

Sistemas de evaluación	Ponderación mínima	Ponderación máxima
Evaluación del portafolio. Estudio de casos	20	50
Evaluación del portafolio. Resolución de problemas	20	50

Prueba Final	40	60
--------------	----	----

**Normativa específica:**

**Bibliografía:**