FICHA IDENTIFICATIVA

DATOS DE LA ASIGNATURA

Código: 47118
Nombre: Diseño y síntesis de moléculas bio-activas y su evaluación mediante técnicas in vitro
Ciclo: Máster Universitario Oficial
Créditos ECTS: 6
Curso académico: 2026-27

TITULACIONES

Titulación	Centro	Curso	Periodo
2286 - Máster Universitario en Investigación y Uso Racional del Medicamento	Facultat de Farmàcia i Ciències de l'Alimentació	1	Anual

MATERIAS

Titulación	Materia	Carácter
2286 - Máster Universitario en Investigación y Uso Racional del Medicamento	Investigación preclínica en el desarrollo de nuevos fármacos	OBLIGATORIA

COORDINACIÓN

CABEDO ESCRIG NURIA

APOSTOLOVA ATANASOVSKA NADEZDA

RESUMEN

Esta asignatura aborda el conocimiento de los conceptos básicos necesarios para la realización de un proyecto de investigación desde una perspectiva metodológica, basado en la química médica con reacciones de síntesis, cromatografía en columna para purificación de moléculas y técnicas espectroscópicas de análisis; así como técnicas farmacológicas que incluyen ensayos con cultivos celulares, estudios de interacción ligando-receptor mediante técnicas con radioligandos o técnicas de órgano aislado, junto conlos modelos matemáticos que permiten estudiar y comprender el concepto de receptor y su modulaciónfarmacológica. Con ello se pretende integrar aspectos metodológicos con conocimientos químicos, bioquímicos, fisiológicos y farmacológicos imprescindibles para su adecuada comprensión. Las competencias y los resultados de aprendizaje a alcanzar en esta asignatura, así como la metodología docente utilizada, integran los objetivos de desarrollo sostenible (ODS) promovidos por las Naciones Unidas (Agenda 2030). Entre ellos, es importante destacar el Uso Racional del Medicamento y la promoción de la Salud Comunitaria (Objetivo 3: Salud y Bienestar) y la Educación de Calidad (Objetivo 4).

CONOCIMIENTOS PREVIOS

RELACIÓN CON OTRAS ASIGNATURAS DE LA MISMA TITULACIÓN

No se han especificado restricciones de matrícula con otras asignaturas del plan de estudios.

OTROS TIPOS DE REQUISITOS

Nosehanespecificadorestriccionesdematrículaconotrasasignaturasdelplandeestudios.

COMPETENCIAS / RESULTADOS DE APRENDIZAJE

2286 - Máster Universitario en Investigación y Uso Racional del Medicamento

Actuar con autonomía en el aprendizaje, tomando decisiones fundamentadas en diferentes contextos, emitiendo juicios en base a la experimentación y el análisis y transfiriendo el conocimiento a nuevas situaciones.

Adquirir conocimientos y capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.

Ampliar conocimientos en el área bioquímica para identificación y síntesis de biomoléculas.

Aplicar los aspectos éticos y legales del medicamento tanto a nivel asistencial como los relacionados con los ensayos preclínicos y clínicos, así como resolver los posibles dilemas éticos derivados del uso de los medicamentos.

Capacidad de comprender y seleccionar aquellos conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de nuevas ideas, en el contexto de investigación y una mejora de la salud.

Capacidad de seleccionar y gestionar los recursos disponibles (instrumentales y humanos) para optimizar resultados en investigación.

Capacidad para la comunicación y divulgación de ideas científicas.

Colaborar eficazmente en equipos de trabajo, asumiendo responsabilidades y funciones de liderazgo y contribuyendo a la mejora y desarrollo colectivo.

Conocer los fundamentos que posibilitan el uso racional del medicamento en la sociedad.

Conocer y comprender, desde el propio ámbito de la titulación, las desigualdades por razón de sexo y género en la sociedad; integrar las diferentes necesidades y preferencias por razón de sexo y de género en el diseño de soluciones y resolución de problemas.

Contribuir en el diseño, desarrollo y ejecución de soluciones que den respuesta a demandas sociales, teniendo en cuenta como referente los Objetivos de Desarrollo Sostenible.

Demostrar razonamiento crítico y autocrítico en el ámbito de la titulación, considerando aspectos tales como la ética profesional, los valores morales y las implicaciones sociales de las diferentes actividades realizadas.

Dominar el método científico, el planteamiento de protocolos experimentales y la interpretación de resultados en la búsqueda, desarrollo y evaluación de nuevos fármacos.

Dominar la comunicación científica. Poseer habilidades sociales y comunicativas en la práctica asistencial.

Favorecer la inquietud intelectual y fomentar la responsabilidad del propio aprendizaje.

Formación en la capacidad de comunicación de un modo claro y sin ambigüedades de los conocimientos, conclusiones y razones de forma adecuada a públicos especializados y no especializados.

Formar en los conocimientos y las metodologías necesarias que permitan el análisis y expresión de resultados.

Integrar conocimientos para 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.

Manejar adecuadamente las fuentes de información biomédica y poseer la habilidad de hacer una valoración crítica de las mismas, integrando la información para aportar conocimientos a grupos asistenciales multidisciplinares.

Mostrar respeto y protección a los derechos fundamentales, incluyendo la libertad sexual y la prevención de la violencia sexual.

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.

Proponer soluciones creativas e innovadoras a situaciones o problemas complejos, propios del campo de estudio, para dar respuesta a las diversas necesidades profesionales y sociales.

Proporcionar herramientas y habilidades de aprendizaje que permitan al estudiante ampliar sus conocimientos de una forma autónoma o autodirigida.

Saber comunicarse de manera efectiva, tanto de forma oral como escrita, adaptándose a las características de la situación y de la audiencia.

Saber redactar y preparar presentaciones para posteriormente exponerlas y defenderlas.

Ser capaces de acceder a herramientas de información en otras áreas del conocimiento y utilizarlas apropiadamente.

Ser capaces de acceder a herramientas de información en otras áreas del conocimiento y utilizarlas apropiadamente.

Ser capaces de acceder a la información necesaria (bases de datos, artículos científicos, etc.) y tener suficiente criterio para su interpretación y empleo.

Ser capaces de analizar de forma crítica tanto su trabajo como el de sus compañeros.

Ser capaces de aplicar la experiencia investigadora adquirida en labores propias de su profesión tanto en la empresa privada como en organismos públicos.

Ser capaces de integrar las nuevas tecnologías en su labor profesional y/o investigadora.

Ser capaces de realizar una toma rápida y eficaz de decisiones en su labor profesional y/o investigadora.

Ser capaces de un aprendizaje crítico de forma autónoma y auto-dirigida.

Ser capaces de valorar la necesidad de completar su formación científica, histórica, en lenguas, en informática, en literatura, en ética, social y humana en general, asistiendo a conferencias o cursos y/o realizando actividades complementarias, autoevaluando la aportación que la realización de estas actividades supone para su formación integral.

Trabajar en equipo con eficiencia en su labor profesional y/o investigadora.

Utilizar adecuadamente las herramientas informáticas, métodos estadísticos y de simulación de datos, aplicando los programas informáticos y la estadística a los problemas biomédicos.

DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

BLOQUE TEMÁTICO A.
Introducción al desarrollo de fármacos: - Etapas generales del proceso de descubrimiento y desarrollo de nuevos fármacos; - Concepto de molécula bioactiva y papel de la química medicinal; - Relación entre síntesis química, caracterización estructural y evaluación biológica.
En las metodologías experimentales se incluirá:
- Reacciones de síntesis de moléculas bioactivas. Se llevarán a cabo etapas claves en la obtención de moléculas (ciclación, protección, reducción, etc), para ello se planificará la reacción orgánica, los cálculos estequiométricos, el montaje de la reacción, el control de parámetros experimentales y la seguridad en el laboratorio.
- Técnicas de seguimiento de reacción: Uso de la cromatografía en capa fina (CCF) para monitorizar el avance de las reacciones, la interpretación de resultados y toma de decisiones sobre el trabajo experimental.
- Métodos de purificación de compuestos orgánicos: La extracción líquido/líquido: fundamentos y aplicación en la separación de productos; La cromatografía en columna: principios, elección de fase estacionaria y optimización del proceso; Los criterios de pureza y rendimiento en química medicinal.
- Técnicas de caracterización estructural. Se aprenderá la interpretación mediante resonancia magnética nuclear (RMN) de ^{1}H y ^{13}C, la identificación de señales características y confirmación estructural. Asimismo, se empleará la espectrometría de masas (MS), y se estudiarán los sus principios básicos en la detección, y sus aplicaciones en la determinación de masa molecular y análisis de control de calidad.

BLOQUE TEMÁTICO B.
- Aspectos teóricos:
Concepto de receptor y su repercusión en las Ciencias Biomédicas. Teoría de la interacción fármaco-receptor. Actividad constitutiva, agonismo, agonismo inverso, antagonismo. Sistemas de transducción de la señal. Desarrollo del concepto de señalización a través de receptores como mecanismo fundamental para la modulación fisiológica o farmacológica de los procesos celulares.
- Aspectos metodológicos-prácticos:
Introducción general al órgano aislado como metodología utilizada en un laboratorio de investigación biomédica. Tipos de respuesta: se pretende revisar la manera de estudiar diferentes funciones o respuestas como la función secretora, la motora o la interacción entre las células leucocitarias y endoteliales en el territorio vascular. Concepto de Soluciones Fisiológicas (SSF), condiciones de la experimentación y soluciones de fármacos. Baño de órgano aislado y el animal de experimentación o el ser humano como origen del reactivo biológico (o preparado) a utilizar en estos estudios. Procedimientos de estimulación de un preparado, según la función a estudiar; se revisarán algunos protocolos experimentales

utilizados para evaluar determinados mecanismos implicados en una determinada función, y preparados concretos con sus características particulares.
Técnicas experimentales de estudio de receptores y análisis de los resultados obtenidos. Unión de radioligandos específicos y de ligandos fluorescentes. Análisis de la funcionalidad de los receptores: técnicas de órgano aislado. Se revisarán también otras técnicas de análisis la expresión de receptores como Western blotting, inmunoprecipitación, inmunofluorescencia, microscopía de fluorescencia confocal, RT-PCR cuantitativa a tiempo real. Planteamiento de un problema farmacológico y su resolución en el laboratorio mediante la realización de técnicas de unión de radioligandos y baño de órganos.

BLOQUE TEMÁTICO C.
Se hará una revisión general del cultivo celular como metodología experimental. Se evaluarán los distintos tipos de cultivo celular y se introducirán conceptos como cultivo primario, línea celular, proliferación de células, senescencia, etc. Se analizará la metodología de obtención y mantenimiento del cultivo celular. Se evaluarán las características de cultivos de células concretas y se analizarán técnicas específicas como contaje de células, criopreservación, validación de líneas celulares, contaminación, determinación de la viabilidad celular, etc.
También se analizarán los conceptos de cocultivo, modelos celulares 3D como esferoides y organóides, además de tecnología *state-of-the art* como *organ on a chip*.
Se abordarán las distintas aplicaciones del cultivo células como técnicas microscópicas (microscopia intravital, microscopía de fluorescencia, microscopía confocal), citometría de flujo y técnicas de separación de poblaciones celulares como FACS, análisis del consumo de oxígeno y la bioenergética celular, modificaciones genéticas como silenciamiento o sobreexpresión génica, etc.

esión génica, etc.

VOLUMEN DE TRABAJO (HORAS)

ACTIVIDADES PRESENCIALES

Actividad	Horas
Teoría	16,00
Seminario	13,00
Laboratorio	31,00
Total horas	**60,00**

ACTIVIDADES NO PRESENCIALES

Actividad	Horas
Asistencia a otras actividades	0,00
Elaboración de trabajos individuales o en grupo	0,00
Estudio y trabajo autónomo	0,00
Preparación de clases	0,00
Preparación de actividades de evaluación	0,00
Resolución de casos prácticos	0,00
Total horas	**0,00**

METODOLOGÍA DOCENTE

Actividad PRESENCIAL	Horas
Teoría	18,00
Laboratorio	31,00
Seminarios, debates y trabajos en grupo	11,00
Total horas	**60,00**

Actividad NO PRESENCIAL	Horas
Total horas	**90,00**

Se llevarán a cabo clases teóricas en formato de lección magistral participativa y clases prácticas participativas en el laboratorio y en aula de informática. También se organizarán seminarios y debate o discusión dirigida incluida la elaboración y presentación de trabajos.
Las actividades no presenciales comprenderán consulta de materiales, antecedentes y trabajos relacionados con el tema objeto del curso y además se adaptarán los materiales previstos para la docencia presencial, de modo que el estudiante pueda acceder a ellas en cualquier momento. Utilización del foro del Aula virtual para atender las dudas. Se llevará a cabo la realización de los ejercicios propuestos mediante la opción "Tarea" del aula virtual.
ea" del aula virtual.

EVALUACIÓN

Sistema de Evaluación	Descripción	% Ponderación en la calificación global
SE1. Examen escrito de teoría	Preguntas de tipo test con respuesta múltiple y pregunta de desarrollar y razonar	50
SE4. Evaluación continua	Incluye la valoración durante la realización de las prácticas el trabajo realizado (esfuerzo, motivación, resultados, presentación y participación).	25
SE6. Trabajo en grupo	Se valorará la capacidad de los alumnos para expresar y exponer oralmente las cuestiones que se planteen durante la asignatura.	25

La exigencia mínima para superar la asignatura es obtener un valor igual o mayor al 50% en las consideraciones que se harán en los tres apartados de evaluación. La asistencia al curso es obligatoria y se considera imprescindible la asistencia al 80% del curso.
La copia o plagio manifiesto de cualquier tarea que forme parte de la evaluación supondrá la imposibilidad de superar la asignatura, sometiéndose seguidamente a los procedimientos disciplinarios oportunos. Téngase en cuenta que, de acuerdo con el artículo 13. d) del Estatuto del Estudiante Universitario (RD 1791/2010, de 30 de diciembre), es deber de un estudiante abstenerse en la utilización o cooperación en procedimientos fraudulentos en las pruebas de evaluación, en los trabajos que se realicen o en documentos oficiales de la universidad. Ante prácticas fraudulentas se procederá según lo determinado

por el "Protocolo de actuación ante prácticas fraudulentas en la Universitat de València" (ACGUV 123/2020): https://www.uv.es/sgeneral/Protocols/C83sp.pdf.
cols/C83sp.pdf.

BIBLIOGRAFÍA

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA:

- Barret R. Medicinal Chemistry: Fundamentals. ISTE Press–Elsevier, 2018. ISBN: 978-1785482885.
- Patrick GL. An introduction to medicinal chemistry. Oxford university press, 2023. ISBN: 978-0198866664
- Tietze LF, Eicher T, Diederichsen U, Speicher A. Reactions and Synthesis: in the organic chemistry laboratory. Wiley-VCH Weinheim, Alemania, 2007. ISBN: 978-3527312238
- Nicolaou KC, Sorensen EJ. Classics in total synthesis: targets, strategies, methods. Wiley-VCH, Weinheim, Alemania, 1996. ISBN:978-3527292318
- Wagner H, Bladt S. Plant Drug Analysis: A Thin Layer Chromatography Atlas. Springer, 2009. ISBN: 978-3540586760
- Colegate SM, Molyneux RJ. Bioactive Natural Products. Detection, Isolation and Structural Determination. CRC Press: Boca Raton, 2007. ISBN: 978-0429127540
- Vogel HG, Vogel WH. Drug Discovery and Evaluation. Pharmacological Assays. Springer: Berlin, 2007. ISBN: 978-3540709954
- Holzgrabe U, Wawer I, Diehl B. NMR Spectroscopy in Pharmaceutical Analysis. Elsevier Ltd: Oxford, U.K, 2008. ISBN: 9780-444531735
- Freshney's culture of animal cells: a manual of basic technique and specialized applications. Capes-Davis A, Freshney RI. Wiley Blackwell, 2021. ISBN 978-1119513018.
- Živković Z, Opačak-Bernardi T. An Overview on Spheroid and Organoid Models in Applied Studies. Sci 2025, 7(1), 27; doi: 10.3390/sci7010027
- 3D Cell Culture Methods and Protocols. Sumbalova Koledova, Z. Springer Protocols, Humana Press, 2024. ISBN 978-1-0716-3673-2
- Patra, JK, Das, SK, Das G, Thatoi H. Isolated Tissues and Organs. In: A Practical Guide to Pharmacological Biotechnology. Learning Materials in Biosciences. Springer, Singapore. 2019. https://doi.org/10.1007/978-981-13-6355-9_2.
- Whalen E.J., Rajagopal S., Lefkowitz R.J. Therapeutic potential of b-arrestin- and G protein-biased agonists. Trends in Molecular Medicine (17): 2011.
- Rajagopal S., Rajagopal K., Lefkowitz R.J. Teaching old receptors new tricks:biasing seven
- -transmembrane receptors. Nature Reviews, 9, 2010.
- Zhou X.E., Melcher K., XU H.E. Understanding the GPCR biased signaling through G
- protein and arrestin complex structures. Current Opinion in Structural Biology. 45: 150-159, 2017.
- Kenakin T. International Union of Basic and Clinical Pharmacology Review. New concepts in pharmacological efficacy at 7TM receptors: IUPHAR. Br. J. Pharmacol. 168: 554-575, 2013.
- Scharge R., De Min A, Hochheiser K, Kostenis E., Mohr K. Superagonism at G protein-coupled receptors and beyond. Br.J.Pharmacol. 173: 3018-3027, 2016.
- Kenakin T. Signaling bias in drug discovery, Expert Opinion on Drug Discovery, 12:4, 321-333, 2017.
- Jean-Alphonse F., Hanyaloglu A.C. Regulation of GPCR signal networks via membrane trafficking. Molecular and Cellular Endocrinology 331, 205214, 2011.
- Alexander S.P., Mathie A., Peters J.A. Guide to Receptor and Channels, Br J. Pharmacol, 5th edition,(164):S1-S324, 2011.
- Rankovica Z,*, Tarsis F. Brustb, and Laura M. Bohnb,*"Biased agonism: An emerging paradigm in

GPCR drug discovery"

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA:

- Scheerer P., Sommer M.E. Structural mechanism of arrestin activation. Current Opinion in Structural Biology. 45: 160-169, 2017
- Stoddart L.A., White C.W., Nguyen K., Hill S.J., Pfleger K.D.J. Fluorescence- and bioluminescence-based approaches to study GPCR ligand binding. Br. J. Pharmacol. 173: 3028- 3037, 2016.https: //webges.uv.es/uvGuiaDocenteWeb/guia#
- Segura V, Pérez-Aso M, Montó F, Carceller E, Noguera MA, Pediani J, Milligan G,
- MC Grath J, D´Ocon MP. "Differences in the Signaling Pathways of a1A- and a1B Adrenoceptors Are Related to Different Endosomal Targeting" PlosOne 8(5): e64996, 2013.
- MC Grath J. "Localization of -adrenoceptors: JR Vane Medal Lecture" Br. J. Pharmacol. 172: 1179- 1194, 2015
- Von Moo E, van Senten JR, Bräuner-Osborne H, Møller TC. Arrestin-dependent and -independent internalization of GPCRs methods, mechanisms and implications on cell signaling. Mol Pharmacol. 2021; 99(4):242-255 DOI: 10.1124/molpharm.120.000192
- Wu Z, Liu R, Shao N, Zhao Y. Developing 3D bioprinting for organs-on-chips. Lab Chip. 2025;25 (5):1081-1096. doi: 10.1039/d4lc00769g.
- Jespersen B, Tykocki NR, Watts SW, Cobbett PJ. Measurement of smooth muscle function in the isolated tissue bath-applications to pharmacology research. J Vis Exp. 2015;(95):52324. doi: 10.3791/52324.

RECURSOS WEB DE UTILIDAD:

- Agencia Española del Medicamento y Productos Sanitarios http://www.aemps.gob.es
- Base de datos del Medicamento. Consejo General de Colegios Farmacéuticos (BOT): https: //botplusweb.portalfarma.com/
- Sociedad Española de Farmacología: http://www.socesfar.es
- Food and Drug Administration: http://www.fda.gov/
- Drugbank: https://www.drugbank.ca/
- Guide to pharmacological targets IUPHAR/BPS: http://www.guidetopharmacology.org/