

7^a Trobada de Professorat de Ciències de la Salut

Integració Recerca-Docència en Ciències de la Salut



F. Javier Luque
Departament de Fisicoquímica – Institut de Biomedicina

Facultat de Farmàcia
31 Gener 2013

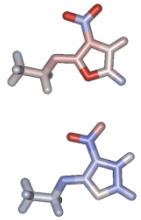


Estratègies en disseny de fàrmacs

1970-80 *Ligand-Based Drug Design*
Propietats fisicoquímiques de lligands
Farmacòfor
Qualitatiu

Structure-Based Drug Design
Interaccions moleculars lligand-receptor
Model estructural atòmic 3D
Quantitatiu

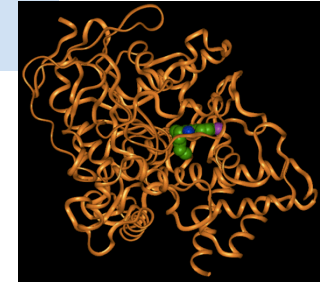
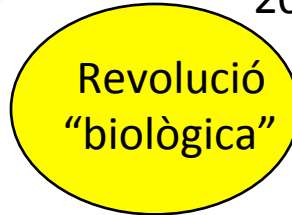
2010



1990

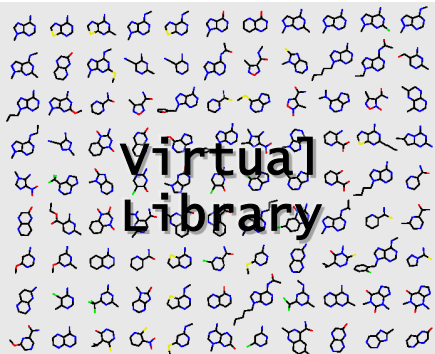


2000



Químio informàtica

Bio informàtica



ZINC¹²



BLAST[®]



T-COFFEE

UniProt

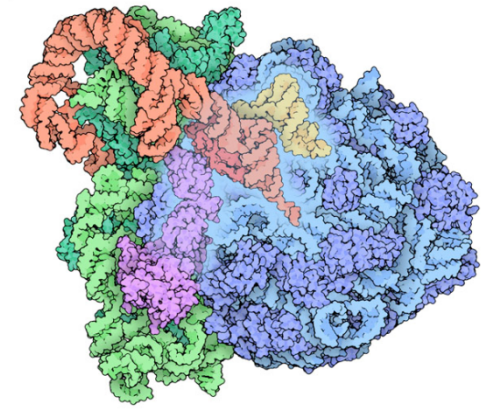
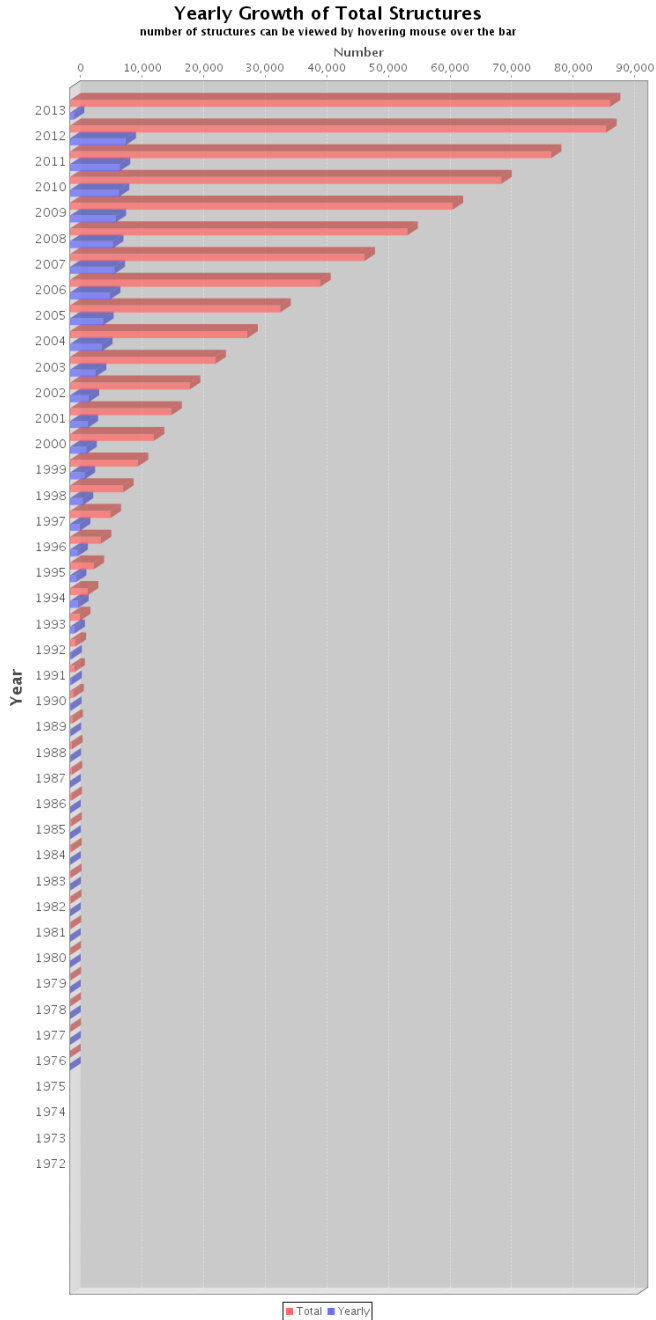
ProBiS²⁰¹²

CLUSTAL

PDBbind

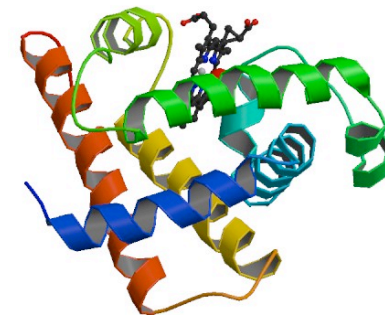
HMMER
biosequence analysis

Rosetta@home
Protein Folding, Design, and Docking



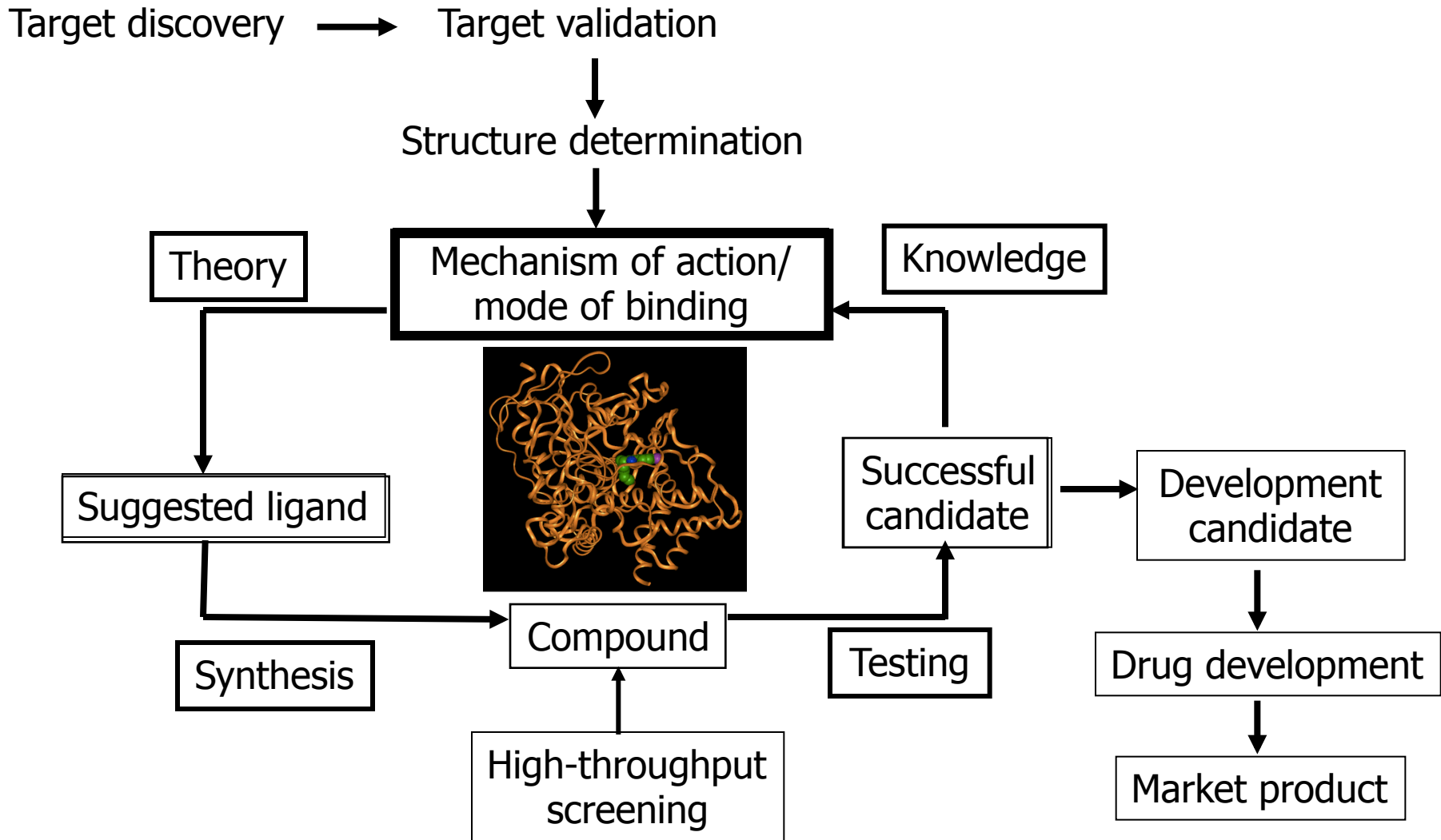
Transfer-messenger RNA
Science 335 (2012) 1366

| Technique | # structures |
|---------------------|--------------|
| X-ray | 77181 |
| NMR | 9779 |
| Electron Microscopy | 501 |
| Other | 220 |
| Total | 87861 |

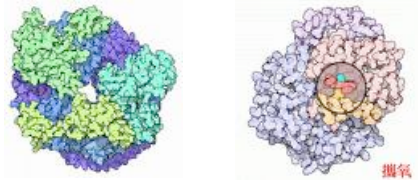
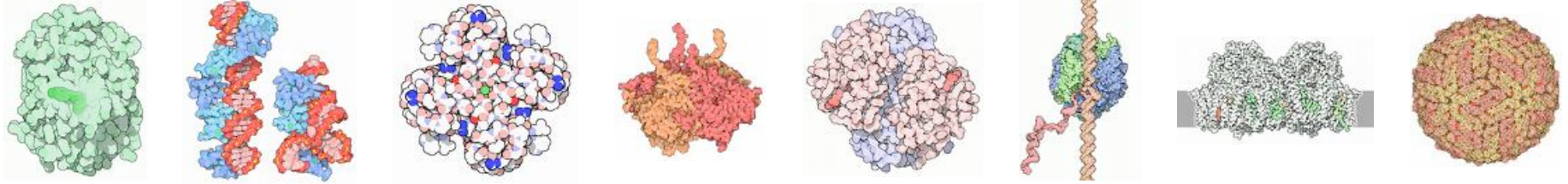


Myoglobin
153 residues
(1976)

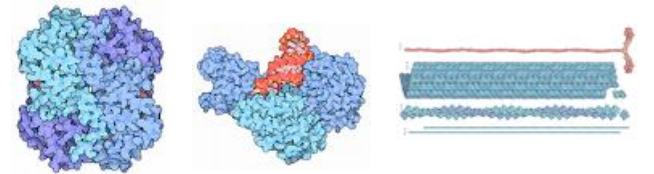
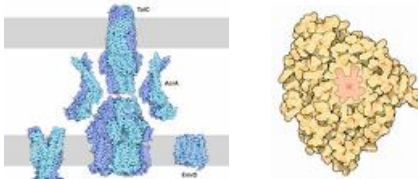
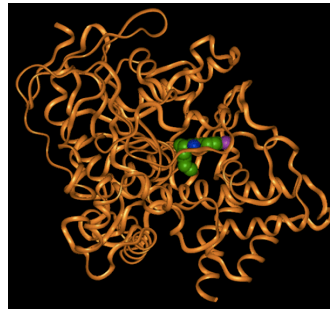
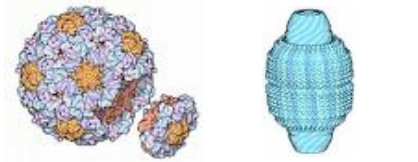
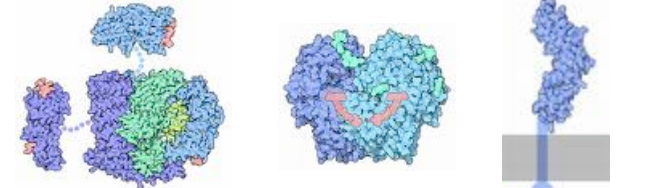
Procés de descobriment de fàrmacs



Expanding the Druggable Genome



Mechanism of action/
mode of binding



•Allosteric Modulators

- Enzyme active sites
- Receptor/transporter binding sites

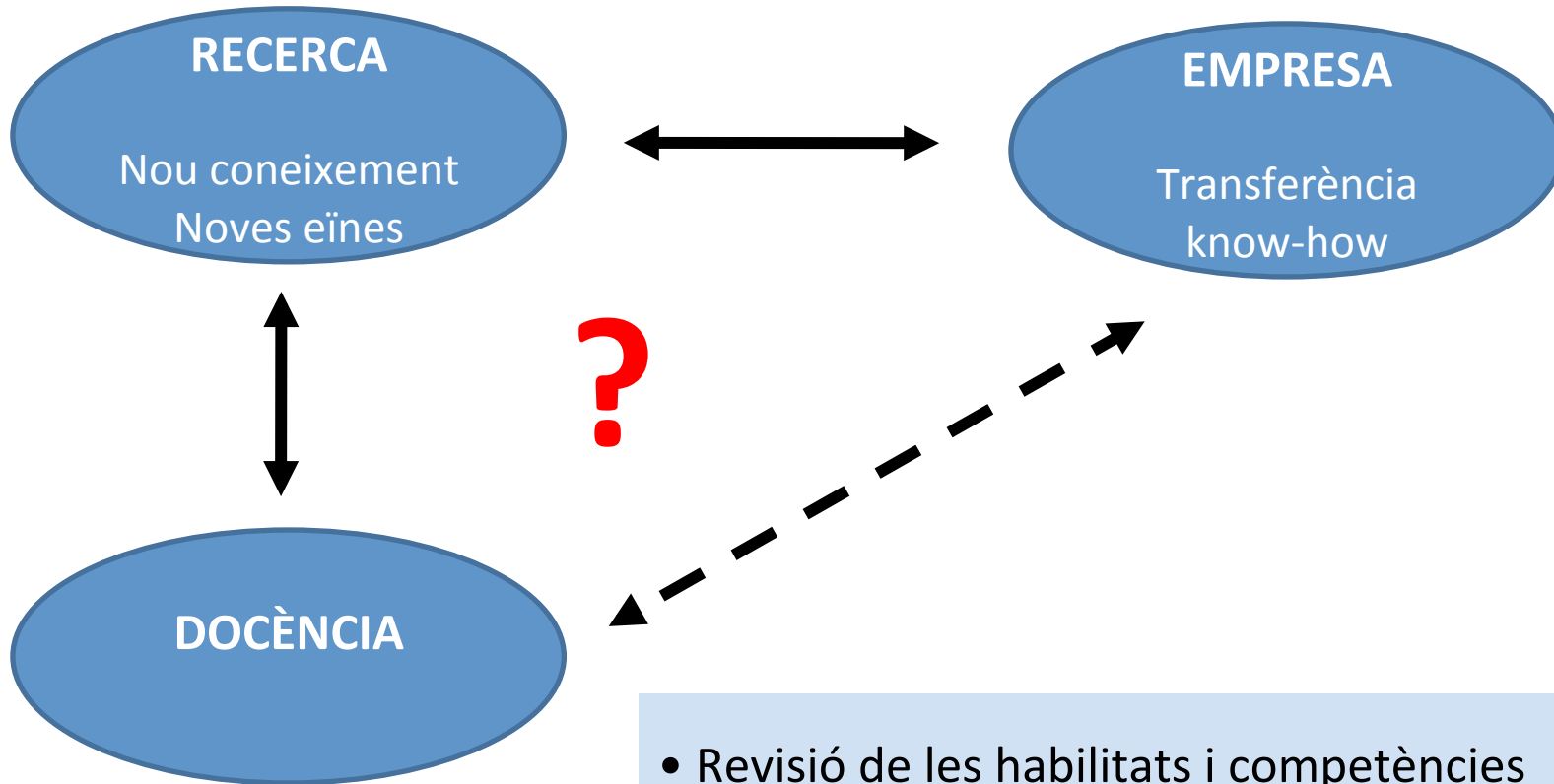
•Transient binding drugs

•Interfacial inhibitors

•Protein-protein inhibitors

•Pharmacological chaperones

Integració Docència-Recerca (Empresa)



- Revisió de les habilitats i competències
- Actualització dels plans d'estudis
- Modificació dels continguts
- Balanç entre activitats teòriques i pràctiques
- Metodologies docents més actives

Adequació de la Integració Recerca-Docència

GRAU

Fisicoquímica (2º i 3er semestre)

- ✓ Impartició de conceptes bàsics, de caire fonamental per a assignatures posteriors
- ✓ Integració feble: aclariment i suport a determinants continguts

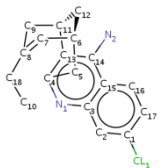
Biotecnologia Farmacèutica – Recerca (7è semestre)

- ✓ Major aprofundiment
- ✓ Integració intensa: acostament al procés de recerca, desenvolupament de competències per tractar problemes reals, habilitats en tècniques emprades en recerca

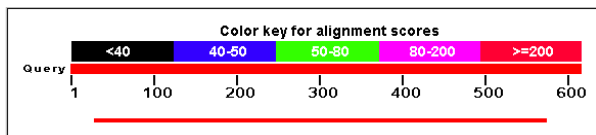
POSTGRAU

- ✓ Entorn proper a la recerca del grup
- ✓ Lligam estret i directe amb la recerca: aprofundir en nous continguts i/o desenvolupar noves eïnes de coneixement

Unió d'haprina X a l'enzim acetilcolinesterasa

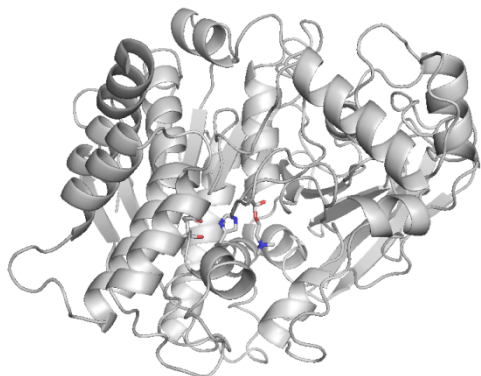


Blastp Alineament de seqüència

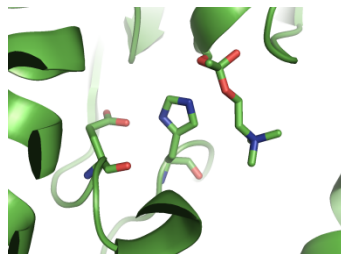


SwissModel

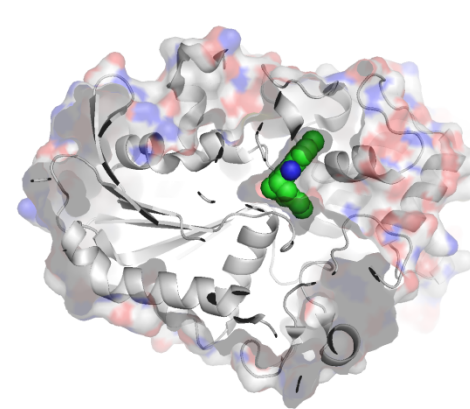
Predicció estructural



Mecanisme de catàlisi enzimàtica



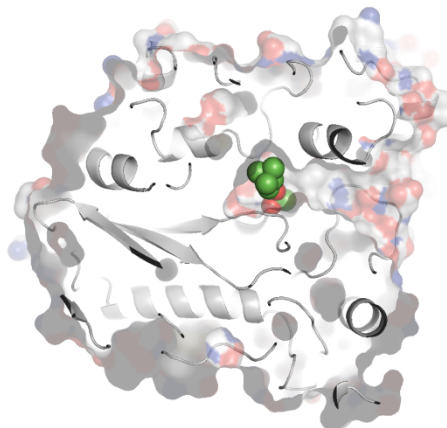
Docking d'inhibidors



rDock
AutoDock

Pymol
(Fpocket)

Cerca de llocs d'unió



Com implementar-ho?



- ✓ Aules d'informàtica.
- ✓ Disponibilitat de programes (Pymol) i bona comunicació per xarxa (accés a servidors on line).
- ✓ Limitació de certs programes per llicències d'ús o cost econòmic (GLIDE, MOE).
- ✓ Preparació prèvia per exercir les habilitats de visualització molecular.
- ✓ Utilització de software accessible en Windows (exclou eïnes disponibles en UNIX)
- ✓ Dissenyar un protocol robust, per minimitzar l'efecte de "problemes informàtics".
- ✓ Ratio estudiant/professor baixa.

Consideracions finals

Implicacions per a l'estudiant:

- ✓ Acostar l'estudiant a un entorn de recerca i afavorir la visió aplicada (I+D) de la matèria des d'una perspectiva "puntera"
- ✓ Exercitar el contacte directe amb noves eines tecnològiques i aplicar-les per generar nou coneixement
- ✓ Promoure el treball personal a través de metodologies actives per al desenvolupament de competències
- ✓ *Possibilitat d'ús d'infraestructures finançades per projectes de recerca*
- ✓ *Possibilitat de contacte amb persones i institucions vinculades a la recerca*

Implicacions per al professor:

- ✓ Permet mantenir una estreta correspondència entre recerca i docència
- ✓ Focalitzar la docència cap a problemes professionals actuals
- ✓ Difuminar la separació entre temps dedicat a recerca i docència