



GUÍA DOCENTE 2024-2025
Nanotoxicología y nanofarmacología

1. Denominación de la asignatura:

NANOTOXICOLOGÍA Y NANOFARMACOLOGÍA

Titulación

Máster Universitario en Ingeniería Biomédica

Código

9087

2. Departamento(s) responsable(s) de la asignatura:

Departamento de Física. Departamento de Química

3.a Profesor/a que imparte la docencia (Si fuese impartida por más de uno/a incluir todos/as) :

Alfredo Bol Arriba, Pedro Ángel Marcos Villa, Santiago Aparicio Martínez, Alberto Gutiérrez Vega

3.b Coordinador/a de la asignatura

Alfredo Bol Arriba

4. Curso y semestre en el que se imparte la asignatura:

Curso único. Primer Semestre

5. Tipo de la asignatura: (Básica, obligatoria u optativa)

Obligatoria

6. Número de créditos ECTS de la asignatura:

4,5



7. Competencias que debe adquirir el/la estudiante al cursar la asignatura

CC10: Conocer técnicas de simulación computacional a escala nanométrica para el diseño de fármacos y el estudio de toxicidad.
HD09: Adquirir destreza en el manejo de herramientas computacionales tanto clásicas como basadas en inteligencia artificial para el cálculo de propiedades estructurales y electrónicas de moléculas con potencial terapéutico o tóxico en su interacción con biomoléculas.
CO14: Identificar pautas generales del potencial terapéutico o tóxico en el diseño de moléculas.

8. Programa de la asignatura

8.1- Objetivos docentes

Los objetivos docentes son la adquisición de las siguientes competencias, habilidades, destrezas y contenidos:

Competencias:

Identificar pautas generales del potencial terapéutico o tóxico en el diseño de moléculas.

Comprender la complejidad de los sistemas biológicos y reconocer la utilidad de los métodos computacionales para obtener una aproximación al comportamiento y función de las biomoléculas.

Habilidades y Destrezas:

Ser capaz de integrar los conocimientos multidisciplinares asociados a biología e informática, para su aplicación en biomedicina.

Adquirir destreza en el manejo de herramientas computacionales tanto clásicas como basadas en inteligencia artificial para el cálculo de propiedades estructurales y electrónicas de moléculas con potencial terapéutico o tóxico en su interacción con biomoléculas.

Desarrollar un trabajo personal donde se apliquen los conocimientos teóricos y prácticos adquiridos en la titulación. TIPO:

Habilidades o destrezas

Conocimientos:

Conocer técnicas de simulación computacional a escala nanométrica para el diseño de fármacos y el estudio de toxicidad.



8.2- Unidades docentes (Bloques de contenidos)
Sección 1 Tema 1. Mecánica Estadística Clásica Tema 2. Simulaciones de Dinámica Molecular.
Sección 2 Tema 3. Mecánica Cuántica. La ecuación de Schrödinger. Tema 4. La formulación de la Teoría del Funcional de la Densidad (Density Functional Theory, DFT) de la Mecánica Cuántica. Tema 5. Simulaciones de DFT.
Sección 3 Tema 6. Acoplamiento molecular (molecular docking). Aplicaciones farmacológicas y toxicológicas. Tema 7. Aplicación de la inteligencia artificial al desarrollo de modelos farmacológicos y toxicológicos.
8.3- Acceso a la Bibliografía Recomendada desde Leganto
https://leganto.ubu.es/leganto/public/34BUC_UBU/lists?courseCode=9087&auth=SAML

9. Metodología de enseñanza y aprendizaje y su relación con las competencias que debe adquirir el/la estudiante:

Metodología	Competencia relacionada	Horas presenciales	Horas de trabajo	Total de horas
MD1. Clase magistral/expositiva	CO9	13	16	29
MD2. Resolución de casos prácticos y discusión dirigida.	CO9, HD08, CC09	14	17	31
MD4. Resolución de problemas, casos	CO9, HD08, CC09	14	17	31



prácticos y ejercicios.				
MD6. Tutorías.	CO9,CC09	0	2	2
MD8. Revisión y asesoramiento en la elaboración de trabajos.	CO9, CC09	0	4	4
MD10. Elaboración de informes y trabajos individualmente o en grupo.	CO9, HD08, CC09	0	15	15
Total		41	71	112

10. Sistemas de evaluación:

La evaluación persigue acreditar que el alumnado alcanza suficientemente los resultados de aprendizaje previstos. Para ello se adaptan las evidencias de aprendizaje en que se fundamenta la evaluación a la distribución interna de la asignatura organizada con 1/3 del tiempo reservado para contenidos teóricos fundamentales y 2/3 para el manejo de herramientas computacionales. La fracción de 1/3 correspondiente a contenidos teóricos se evaluará mediante test multirrespuesta. Los 2/3 de contenidos prácticos se evaluarán mediante la entrega individual de tres trabajos, de un peso de un 22 % cada uno en la evaluación completa, que se irán elaborando inicialmente con la guía de los profesores en las sesiones presenciales, serán continuados autónomamente por los alumnos y revisados en sesiones de tutoría antes de la entrega para la calificación. Los tres trabajos serán sobre Dinámica Molecular Clásica, DFT y docking y/o una aplicación de Inteligencia Artificial.

Procedimiento	Peso primera convocatoria	Peso segunda convocatoria
SE5. Pruebas de conocimientos y cuestiones teóricas de la materia.	33 %	33 %
SE7. Realización de trabajos o evaluación de actividades de tipo práctico.	67 %	67 %
Total	100 %	100 %



UNIVERSIDAD DE BURGOS

DEPARTAMENTO DE FÍSICA. DEPARTAMENTO DE QUÍMICA

11. Idioma en que se imparte:

Español/Inglés