



CEU



UNIVERSIDAD COMPLUTENSE
MADRID



Universidad
de Alcalá

GUÍA DOCENTE

TÉCNICAS BIOANALÍTICAS AVANZADAS

Máster Interuniversitario en DESCUBRIMIENTO DE FÁRMACOS

Curso Académico 2024/25

I.- IDENTIFICACIÓN

NOMBRE DE LA MATERIA: Técnicas Bioanalíticas Avanzadas

CARÁCTER: Optativa

MÓDULO: Síntesis y Caracterización de fármacos

SEMESTRE: Segundo

CRÉDITOS: 3 ECTS

DEPARTAMENTOS:

Química y Bioquímica, Facultad de Farmacia, Universidad San Pablo CEU

PROFESOR/ES RESPONSABLE/S:

Coordinadora:

Prof^a Dra. Antonia García Fernández, Profesora catedrática
e-mail: antogar@ceu.es

Profesores:

Prof^a Dra. Coral Barbas Arribas, Profesora catedrática
e-mail: cbarbas@ceu.es

Prof^a Dra. Ana Gradillas Nicolás, Titular
e-mail: gradini@ceu.es

Prof^a Dra. Carolina González Riaño (USP-CEU), Profesora colaboradora
e-mail: gradini@ceu.es

Prof. Dr. Víctor González Ruíz (USP-CEU), Profesor colaborador

Prof^a Dra. M^a Ángeles López González (USP-CEU), Titular
e-mail: alopgon@ceu.es

Prof^a Dra. Fernanda Rey-Stolle (USP-CEU), Profesora catedrática
e-mail: frstolle@ceu.es

Prof. Dr. Francisco Javier Rupérez Pascualena (USP-CEU), Titular
e-mail: ruperez@ceu.es

II.- OBJETIVOS

La metabolómica, la proteómica y la lipidómica son todas disciplinas "ómicas" pero con diferentes requisitos, así como flujo de trabajo y tipo de información proporcionada. El objetivo de este curso es ofrecer a estudiantes graduados conocimientos de todas ellas, e identificar el potencial valor de la información obtenida de aplicación en el área de las ciencias de la vida. Para ello, en primer lugar, el curso cubrirá los aspectos principales de la espectrometría de masas molecular, incluyendo las innovaciones más recientes en el diseño de equipos, con sus ventajas y desventajas, así como el detalle de los procesos de espectrometría de masas de utilidad en la elucidación estructural. En segundo lugar, tratará los fundamentos de las técnicas de separación de alta eficacia acopladas a la espectrometría de masas, mecanismos de separación, instrumentación,

tratamiento de muestra y aplicaciones.

III.- CONOCIMIENTOS PREVIOS Y RECOMENDACIONES

No se establecen requisitos previos.

RECOMENDACIONES:

Se recomienda tener conocimientos de Química Orgánica y Química Analítica.

IV.- CONTENIDOS

BREVE DESCRIPCIÓN DE LOS CONTENIDOS:

En esta asignatura se estudian las diferentes técnicas analíticas basadas en espectrometría de masas acopladas a técnicas de separación. Se abordarán desde el punto de vista teórico y práctico los siguientes aspectos con especial énfasis en sus aplicaciones: Fuentes de ionización y analizadores. Acoplamientos. Espectrometría de masas en tándem. Patrones de fragmentación de moléculas orgánicas. Mecanismos de separación modernos y optimización de métodos en cromatografía de líquidos. Cromatografía de gases acoplada a la espectrometría de masas moderna: tratamiento de muestra y formación de derivados volátiles, reprocesado de datos y utilización de librerías de espectros. Fundamentos y aplicaciones de la electroforesis capilar acoplada a la espectrometría de masas.

Por último, el curso abarcará los tipos de estudios de metabolómica, proteómica y lipidómica basados en las diferentes aproximaciones. Se describirán las etapas en el análisis ómico incluyendo estrategias de procesado de datos y se evaluará sus fortalezas y debilidades desde una perspectiva crítica a través del estudio de una selección de artículos científicos previamente publicados. Además, se describirán diversos recursos de bioinformática de uso actual.

V.- BIBLIOGRAFÍA

1. Gary L. Glish, Richard W. Vachet. The basics of mass spectrometry in the twenty-first century. *Nature Reviews Drug Discovery* (2003) 2, 140-150.
2. Fred W. McLafferty. A Century of Progress in Molecular Mass Spectrometry. *Annual Reviews of Analytical Chemistry* (2011) 4, 1-22.
3. James J Pitt. Principles and Applications of Liquid Chromatography-Mass Spectrometry in Clinical Biochemistry. *Clinical Biochemistry Reviews* (2009) 30, 19-34.
4. Annalaura Mastrangelo, Alessia Ferrarini, Fernanda Rey-Stolle, Antonia Garcia, Coral Barbas. From sample treatment to biomarker discovery: A

- tutorial for untargeted metabolomics based on GC-(EI)-Q-MS. *Analytica Chimica Acta*. (2015) 900, 21-35.
5. Antonia Garcia, Shama Naz, Coral Barbas. Metabolite fingerprinting by capillary electrophoresis-mass spectrometry. *Methods Mol Biol* (2014) 1198, 107-223.
 6. Shama Naz, Antonia Garcia, Magdalena Rusak, Coral Barbas. Method development and validation for rat serum fingerprinting with CE-MS: application to ventilator-induced-lung-injury study (2013), 405(14) 4849-4858.
 7. *Liquid chromatography - Mass Spectrometry*. W.M.A. NIESSEN y J. VAN DER GREEF. New York, MarceI Dekker Inc. 1993.
 8. *Mass Spectrometry for Biotechnology*. G. SIUZDAK. Academic Press Inc. California. 1996.
 9. *Mass Spectrometry. Principles and Applications*. E DE HOFFMANN, J.CHARETTE Y V. STROOBANT, John Wiley, 1996.
 10. *Understanding Mass Spectra: A Basic Approach*. R. MARTIN SMITH. Wiley & Sons. 1999.
 11. "Mass spectrometry" J. BARKER, serie ACOL (2000)
 12. *A Beginner's Guide to "Mass Spectral Interpretation"* T.A. LEE, John Wiley (1998)

VI.- COMPETENCIAS

BÁSICAS Y GENERALES

CB06- 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, en el campo del Descubrimiento de Fármacos.

CB07- Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con el Descubrimiento de Fármacos.

CB08- Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y 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.

CB09- Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones -y los conocimientos y razones últimas que las sustentan- a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.

CB10- Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.

CG1- Conocer y utilizar las Tecnologías de la Información y la

Comunicación aplicadas al Descubrimiento de Fármacos.

CG2- Conocer y aplicar la normativa y regulación local, autonómica, nacional e internacional en el ámbito del Descubrimiento de Fármacos.

CG3- Comprender y ser capaz de aplicar las herramientas básicas de investigación en el ámbito del Descubrimiento de Fármacos.

CG4- Comprender, analizar y evaluar teorías, resultados y desarrollos en el idioma de referencia, además de en la lengua materna, en el ámbito del Descubrimiento de Fármacos.

CG5- Poseer conocimientos racionales y críticos en el estudio del Descubrimiento de Fármacos.

CG6- Conocer los métodos, técnicas e instrumentos de análisis para el estudio del Descubrimiento de Fármacos.

CG7. Capacidad para encontrar soluciones alternativas en el planteamiento de un problema o en la utilización del Descubrimiento de Fármacos.

CG8- Conocer los fundamentos y las implicaciones económicas de los procesos de producción y aplicación del Descubrimiento de Fármacos.

CG9- Resolver casos prácticos conforme al Descubrimiento de Fármacos, lo que implica la elaboración previa de material, la identificación de cuestiones problemáticas, la selección, interpretación y la exposición argumentada del Descubrimiento de Fármacos.

COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

CE01. Comprensión sistemática del campo de estudio del Descubrimiento de Fármacos y el dominio de las habilidades y métodos de investigación relacionados con dicho campo.

CE02- Capacidad de realizar un análisis crítico, evaluación y síntesis de ideas nuevas y complejas en Descubrimiento de Fármacos.

CE09- Conocimiento de los fundamentos, instrumentación, alcance y aplicaciones de los métodos utilizados para caracterizar y analizar los fármacos y para determinar niveles de impurezas, así como su aplicación al campo biológico.

VII.- RESULTADOS DEL APRENDIZAJE

Tras terminar el curso, el estudiante debe ser capaz de:

1. Revisión crítica de los analizadores de masas y fuentes de ionización disponibles, conociendo sus ventajas y desventajas, incluyendo los modos de trabajo en análisis en MS en tándem

2. Reconocer modelos de fragmentación de moléculas orgánicas principalmente de metabolitos pequeños, proteínas y lípidos.
3. Discutir ampliamente los diferentes mecanismos de separación acoplados a MS en metabolómica, proteómica y lipidómica.
4. Conocer y entender los diferentes métodos de tratamiento de muestra y sus limitaciones.
5. Identificar todas las etapas del estudio y sus diferentes enfoques o aproximaciones
6. Discutir el uso de software público en el reprocesado de datos y análisis de rutas metabólicas
7. Adquisición de habilidades básicas en el uso de bases de datos útiles como recursos de acceso gratuito
8. Explicar a personas no especialistas la forma en que estas tres disciplinas "ómicas" pueden proporcionar información de valor en las diferentes áreas de las Ciencias de la Vida.

VIII.- HORAS DE TRABAJO POR ACTIVIDAD FORMATIVA

Actividades formativas	Metodología	Horas	ECTS	Relación con las competencias
Clase magistral	Lecciones expositivas con sistemas audiovisuales	20	2	Competencias: CE01, CE09,
Clases prácticas y talleres	Visitas a laboratorios de investigación. Metabolómica y proteómica con muestras biológicas. Análisis de datos con herramientas disponibles online gratuitas	8	0.8	Competencias: CE01, CE02, CE09
Exposiciones y evaluación	Exposición de trabajos y evaluación	2	0.2	Competencias: CE01, CE02, CE09

IX.- METODOLOGÍA

Las clases magistrales se impartirán al grupo completo de alumnos y consistirán en conferencias por profesores internos y externos o por profesionales de la industria o administración nacionales o extranjeros.

Los seminarios y clases prácticas se realizarán en los laboratorios de espectrometría de masas correspondientes en los que los alumnos manejarán los equipos.

Estarán disponibles tutorías para alumnos que de manera individual deseen resolver las dudas que surjan durante el estudio. Estas tutorías se

realizarán de forma presencial en los horarios indicados por cada profesor. Se utilizará el *Campus Virtual* o la página web del Máster para permitir una comunicación fluida entre profesores y alumnos y como instrumento para poner a disposición de los alumnos el material que se utilizará en las clases tanto teóricas como prácticas y talleres.

X.- EVALUACIÓN

La asistencia a las actividades presenciales es obligatoria. Se requiere una asistencia mínima del 80% de estas actividades para que el alumno sea evaluado.

Para la evaluación del alumno se tendrán en cuenta las prácticas y la participación activa del alumno en todas las actividades docentes así como la memoria entregada y la exposición realizada.

Para superar la asignatura será necesario haber realizado las prácticas.

La calificación se llevará a cabo según el siguiente baremo:

1. Evaluación de la exposición oral pública de un tema seleccionado
85%
2. Prácticas y actividades en clase (15%)