



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
PROGRAMA DE
MAESTRIA Y DOCTORADO EN CIENCIAS QUIMICAS



Programa de actividad académica

Nombre de la asignatura: Química Farmacéutica I						
Clave:	Semestre:	Campo de conocimiento: Química Farmacéutica		No. Créditos: 6		
Carácter: Optativa de elección			Horas	Total horas/ semana	Total horas/ semestre	
Tipo: Teórico			Teoría:	Práctica:	3	48
			3			
Modalidad: CURSO			Duración del programa: 16 semanas			

Actividad académica con seriación antecedente: ninguna
Objetivo general. El alumno integrará los diversos procedimientos o estrategias utilizadas en el diseño de moléculas bioactivas en un protocolo propuesto para descubrir u optimizar compuestos destinados al tratamiento o profilaxis de una enfermedad.
Objetivos específicos El alumno: 1. Identificará los diferentes procedimientos usados para el descubrimiento de principios activos con peso molecular menor a 1 kDa. 2. Categorizará las estrategias empleadas para optimizar la actividad biológica de moléculas cuyo blanco molecular (diana biológica) no es conocido. 3. Examinará los procedimientos utilizados para el diseño de moléculas bioactivas cuando el blanco molecular es conocido. 4. Explicará las relaciones entre la estructura química, propiedades fisicoquímicas, actividad biológica e impacto terapéutico que manifiesten los compuestos orgánicos bioactivos. 5. Analizará la influencia de la solubilidad acuosa, liposolubilidad y grado de ionización de los compuestos orgánicos activos y su influencia en el diseño de moléculas bioactivas. 6. Elegirá el diseño de un profármaco o un híbrido para optimizar un compuesto bioactivo.

Índice temático			
Unidad	Tema	Horas	
		Teóricas	Prácticas
1	Presentación de los objetivos del curso y elementos de evaluación	1	
2	Conceptos y definiciones en Química Farmacéutica	2	
3	Procedimientos históricos para descubrir compuestos bioactivos (<i>hits</i>)	3	
4	Recursos recientes para el descubrimiento de compuestos bioactivos	7	
5	Consideraciones sobre la potencia de la actividad biológica en la elección de la molécula bioactiva (prototipo) que continuará en el proyecto de investigación	2	
6	La importancia de las propiedades fisicoquímicas en los criterios de selección de prototipos. Recursos de primera opción para modificar estas propiedades	6	
7	Cambios estructurales para optimizar la estructura de un prototipo	6	
8	Estudio de compuestos bioactivos cuando no se conoce el receptor con el cual interaccionan: Estudios cualitativos y cuantitativos de relación estructura-actividad (SAR y QSAR)	6	
9	El concepto de receptor (blanco molecular o diana biológica): Tipos y características para ser considerado en la búsqueda de prototipos.	6	
10	Estudios de compuestos activos cuando se conoce el receptor con el que interaccionan. Importancia de la presencia de centros estereogénicos en los compuestos bioactivos en la interacción con el sitio receptor	3	
11	Optimización de prototipos cuando se conoce la estructura del receptor. Acoplamiento molecular automatizado (<i>docking</i>) y diseño <i>de novo</i> .	3	
12	El diseño de profármacos o híbridos para optimizar la actividad biológica	3	
Total de horas teóricas:		48	
Total de horas prácticas:		0	
Suma total de horas:		48	

Bibliografía básica actualizada.

<ol style="list-style-type: none"> 1. Werngard Czechtizky, Peter Hamley. Small molecule medicinal chemistry. Strategies and technologies. John Wiley and Sons. Inc. USA. 2016. ISBN: 978-1-118-77160-0 2. Silverman R.B. The organic chemistry of drug design and drug action. Third Edition. Elsevier-Academic Press. USA. 2014. ISBN: 1415161718 10987654321 3. Graham Patrick. An introduction to medicinal chemistry. Fifth edition. Oxford University Press. UK. 2013. ISBN: 978-019-107391-5 																																					
<p>Bibliografía complementaria. Revisión de artículos publicados en:</p> <ol style="list-style-type: none"> a) Journal of Medicinal Chemistry (American Chemical Society) ISSN: 1520-4804, Factor de impacto: 6.25 b) European Journal of Medicinal Chemistry (Elsevier) ISSN: 0223-5234, Factor de impacto: 4.35 c) Drug Discovery Today (Elsevier) ISSN: 1359-6446; Factor de impacto: 6.11. 																																					
<p>Sugerencias didácticas:</p> <table> <tr><td>Exposición oral</td><td>(√)</td></tr> <tr><td>Exposición audiovisual</td><td>()</td></tr> <tr><td>Ejercicios dentro de clase</td><td>()</td></tr> <tr><td>Ejercicios fuera del aula</td><td>()</td></tr> <tr><td>Seminarios</td><td>(√)</td></tr> <tr><td>Lecturas obligatorias</td><td>(√)</td></tr> <tr><td>Trabajo de investigación</td><td>(√)</td></tr> <tr><td>Prácticas de taller o laboratorio</td><td>()</td></tr> <tr><td>Prácticas de campo</td><td>()</td></tr> <tr><td>Otras: _____</td><td>()</td></tr> </table>	Exposición oral	(√)	Exposición audiovisual	()	Ejercicios dentro de clase	()	Ejercicios fuera del aula	()	Seminarios	(√)	Lecturas obligatorias	(√)	Trabajo de investigación	(√)	Prácticas de taller o laboratorio	()	Prácticas de campo	()	Otras: _____	()	<p>Mecanismos de evaluación del aprendizaje de los alumnos:</p> <table> <tr><td>Exámenes parciales</td><td>()</td></tr> <tr><td>Examen final escrito</td><td>(√)</td></tr> <tr><td>Trabajos y tareas fuera del aula</td><td>()</td></tr> <tr><td>Exposición de seminarios por los alumnos</td><td>(√)</td></tr> <tr><td>Participación en clase</td><td>()</td></tr> <tr><td>Asistencia</td><td>(√)</td></tr> <tr><td>Seminario</td><td>()</td></tr> <tr><td>Presentación de un protocolo de investigación</td><td>(√)</td></tr> </table>	Exámenes parciales	()	Examen final escrito	(√)	Trabajos y tareas fuera del aula	()	Exposición de seminarios por los alumnos	(√)	Participación en clase	()	Asistencia	(√)	Seminario	()	Presentación de un protocolo de investigación	(√)
Exposición oral	(√)																																				
Exposición audiovisual	()																																				
Ejercicios dentro de clase	()																																				
Ejercicios fuera del aula	()																																				
Seminarios	(√)																																				
Lecturas obligatorias	(√)																																				
Trabajo de investigación	(√)																																				
Prácticas de taller o laboratorio	()																																				
Prácticas de campo	()																																				
Otras: _____	()																																				
Exámenes parciales	()																																				
Examen final escrito	(√)																																				
Trabajos y tareas fuera del aula	()																																				
Exposición de seminarios por los alumnos	(√)																																				
Participación en clase	()																																				
Asistencia	(√)																																				
Seminario	()																																				
Presentación de un protocolo de investigación	(√)																																				