



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
PROGRAMA DE
MAESTRIA Y DOCTORADO EN CIENCIAS QUIMICAS
DENOMINACIÓN DE LA ENTIDADES PARTICIPANTES
Programa de actividad académica



Denominación: Quimioinformática en el desarrollo de fármacos					
Clave:	Semestre:	Campo de conocimiento: Química	No. Créditos: 6		
Carácter: Optativa de elección		Horas por semana	Total horas/ semana	Total horas/ semestre	
Tipo: Teórico		Teoría:	Práctica:	3	48
		3	0		
Modalidad: CURSO		Duración del programa: 16 semanas			

Actividad académica con seriación antecedente:
Objetivo general: Analizar conceptos fundamentales de quimioinformática y modelado molecular aplicados al estudio de compuestos con actividad biológica.
Objetivos específicos: 1. Conocer los alcances y limitaciones de métodos computacionales empleados comúnmente en el estudio de compuestos con actividad biológica. 2. Analizar y discutir casos de estudio recientes publicados en la literatura. 3. Introducirse en las tendencias actuales y retos futuros de métodos quimioinformáticos para el desarrollo de fármacos. 4. Revisar y aplicar estrategias para la publicación de trabajos computacionales en revistas científicas.

Índice temático			
Unidad	Tema	Horas	
		Teóricas	Prácticas
1	Introducción al Diseño de Fármacos Asistido por Computadora (DiFAC)	6	0
2	Quimioinformática: Aplicaciones a la investigación de compuestos con actividad biológica	12	0
3	Acoplamiento molecular automatizado (<i>docking</i>)	9	0
4	Evaluación computacional de bases de datos moleculares (<i>virtual screening</i>)	6	0
5	Estudio computacional de relaciones estructura-actividad (SAR): QSAR y panoramas de actividad (<i>activity landscapes</i>)	6	0
6	El futuro de métodos quimioinformáticos aplicados al diseño de fármacos: tópicos selectos	6	0
7	Difusión de resultados en revistas científicas	3	0
Total de horas teóricas:		48	
Total de horas prácticas:		0	
Suma total de horas:		48	

Contenido Temático	
Unidad	Tema y subtemas
1	Introducción al Diseño de Fármacos Asistido por Computadora (DiFAC) 1.1 Desarrollo de fármacos 1.2 Objetivos y estrategias del DiFAC 1.3 Métodos comunes empleados en DiFAC 1.4 Casos exitosos del DiFAC
2	Quimioinformática: Aplicaciones a la investigación de compuestos con actividad biológica 2.1 Bases de datos moleculares 2.2 Espacio químico: visualización de datos 2.3 Similitud molecular 2.4 Análisis automatizado de núcleos base y fragmentos moleculares 2.5 Perfil de propiedades 2.6 Casos de estudio
3	Acoplamiento molecular automatizado (<i>docking</i>)

	3.1 Métodos y programas de cómputo para realizar docking 3.2 Acoplamiento molecular de moléculas bioactivas para elucidar mecanismos de acción 3.3 Acoplamiento molecular para la optimización de la actividad biológica 3.4 Casos de estudio
4	Evaluación computacional de bases de datos moleculares (<i>virtual screening</i>) 4.1 Etapas fundamentales del cribado virtual 4.2 Filtrado de bases de datos moleculares 4.3 Elección de métodos 4.4 Búsqueda por similitud molecular 4.5 Selección de <i>hits</i> 4.6 Casos de estudio
5	Estudio computacional de relaciones estructura-actividad: QSAR y panoramas de actividad (<i>activity landscapes</i>) 5.1 Descriptores moleculares 5.2 Estudios cuantitativos en una, dos y tres dimensiones (2D-QSAR, 3D-QSAR) 5.3 Espacio químico y actividad biológica: 5.4 Panoramas de actividad (<i>activity landscape</i>) 5.4.1 Concepto y métodos 5.4.2 'Acanilados de actividad' (<i>activity cliffs</i>): métodos de identificación, cuantificación e interpretación 5.4.3 <i>Scaffold hops</i> 5.5 Caso de estudios: desarrollo y aplicaciones de mapas de similitud estructural y actividad
6	El futuro de métodos quimioinformáticos aplicados al diseño de fármacos: tópicos selectos 6.1 Quimiogenómica computacional 6.2 <i>Target fishing</i> 6.3 Análisis computacional de <i>big data</i> 6.4 Predicción de propiedades ADME: énfasis en <i>blood-brain barrier penetration</i> 6.5 <i>Protein-Ligand Interaction Fingerprints (PLIFs)</i> : definición y aplicaciones
7	Difusión de resultados en revistas científicas 7.1 Revistas especializadas de cómputo y química farmacéutica computacional 7.2 Planeación de un manuscrito computacional: selección de la revista y tipo de artículo 7.3 Proceso de elaboración del borrador y proceso de revisión de versión final 7.4 Comunicación con co-autores: ética y buenas prácticas 7.5 Envío de manuscrito: Redacción de la carta al editor (<i>cover letter</i>) y sugerencia de revisores 7.6 Sobre la revisión-de-pares: respuesta y acción a los comentarios de editor y/o revisores

Bibliografía básica actualizada:

- Leach AR, Gillet VJ (2007) An Introduction to Chemoinformatics. Dordrecht, The Netherlands: Springer
- Gasteiger J, Engel T. (2003) Chemoinformatics: A Textbook. Weinheim, Germany: Wiley VCH
- Schleyer PvJ. Ed. (1998) Encyclopedia of Computational Chemistry. New York, USA: Wiley

Bibliografía complementaria:

- Bajorath J. Ed. (2014) Chemoinformatics for Drug Discovery. Hoboken, New Jersey, USA: Wiley
- Alvarez J, Shoichet, B. (2005) Virtual Screening in Drug Discovery. Boca Raton, Florida, USA: Taylor and Francis
- Duffy BC et al. (2012) Early phase drug discovery: Cheminformatics and computational techniques in identifying lead series. *Bioorg Med Chem* 20:5324-5342
- Cherkasov A, Muratov EN, Fourches D, Varnek A, Baskin II, et al. (2014) QSAR Modeling: Where have you been? Where are you going to? *J Med Chem* 57: 4977-5010
- Stumpfe D, Hu Y, Dimova D, Bajorath J (2014) Recent progress in understanding activity cliffs and their utility in medicinal chemistry. *J Med Chem* 57: 18-28
- Medina-Franco JL (2012) Scanning structure–activity relationships with structure–activity similarity and related maps: From consensus activity cliffs to selectivity switches. *J Chem Inf Model* 52: 2485-2493
- Medina-Franco JL, Giulianotti MA, Welmaker GS, Houghten RA (2013) Shifting from the single to the multitarget paradigm in drug discovery. *Drug Discovery Today* 18: 495-501

Sugerencias didácticas:

Exposición oral	(X)
Exposición audiovisual	(X)
Ejercicios dentro de clase	(X)
Ejercicios fuera del aula	(X)
Seminarios	(X)
Lecturas obligatorias	(X)
Trabajo de investigación	(X)
Prácticas de taller o laboratorio	()
Prácticas de campo	()
Otras:	()

Mecanismos de evaluación del aprendizaje de los alumnos:

Exámenes parciales	(X)
Examen final escrito	()
Trabajos y tareas fuera del aula	(X)
Exposición de seminarios por los alumnos	(X)
Participación en clase	(X)
Asistencia	()
Seminario	()
Otras: Elaboración de manuscrito	(X)