



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



Programa de actividad académica

Nombre de la asignatura: Taller de Diseño de Fármacos Asistido por Computadora			
Clave:	Semestre:	Campo de conocimiento: Química	No. Créditos: 6
Carácter: Optativa de elección	Horas por semana		Total horas/ semana
Tipo: Curso	Teoría:	Práctica:	Total horas/ semestre
	1	2	
Modalidad: Teórica-práctica	Duración del programa: 16 semanas		

Actividad académica con seriación antecedente: No aplica
Objetivo general: 1. Conocer los fundamentos y utilizar las técnicas del diseño de fármacos asistido por computadora
Objetivos específicos: 1. Analizar y discutir el potencial del modelado molecular en el ámbito del diseño de fármacos. 2. Familiarizarse con el uso de diversos programas, servidores y sitios web de diseño molecular. 3. Discutir los retos y desafíos que enfrenta el diseño de fármacos asistido por computadora.

Índice temático			
Unidad	Tema	Horas	
		Teóricas	Prácticas
1	1 Introducción	1	2
	1.1 Panorama general del modelado molecular en el ámbito del diseño de fármacos 1.2 Definición de las técnicas y conceptos: Acoplamiento molecular <i>in silico</i> , modelo de farmacóforo, y cribado virtual.		
2	2. Estructuras tridimensionales	2	4
	2.1 Uso de la base de datos de <i>Protein Data Bank</i>		
	2.2 Validación de una estructura		
	2.3 Visualización de una estructura 2.4 Detección de cavidades y definición de sitio <i>farmacoviable</i> .		
3	3. Análisis de interacciones intermoleculares no covalentes	2	4
	3.1 Enlaces de hidrógeno		
	3.2 Interacciones de apilamiento		
	3.3 Puentes salinos 3.4 Interacciones hidrofóbicas		
4	4. Modelo de farmacóforo	2	4
	4.1 Definición de farmacóforo		
	4.2 Modelo de farmacóforo basado en el ligando		
	4.3 Modelo de farmacóforo basado en el receptor 4.4 Modelo de farmacóforo híbrido		
5	5. Cribado virtual	2	4
	5.1 Bases de datos de compuestos de baja masa molecular		
	5.2 Exploración del espacio químico		
	5.3 Restricción vía modelo de farmacóforo 5.4 Restricción vía forma molecular		

6	6. Acoplamiento molecular <i>in silico</i> 6.1 Algoritmos de búsqueda 6.2 Funciones de evaluación 6.3 Diagramas de zona de predominio de especie en función del pH 6.4 Preparación del ligando 6.5 Validación de un protocolo de acoplamiento	2	4
7	7. Propiedades ADME 7.1 Representación molecular simplificada 7.2 Cálculo de propiedades fisicoquímicas 7.3 Cálculo de propiedades farmacocinéticas 7.4 Radar de biodisponibilidad	1	2
8	8. Escaneo de alaninas 8.1 Interacciones intermoleculares proteína-proteína 8.2 Interacciones intermoleculares proteína-anticuerpo	1	2
9	9. Revisión de la literatura especializada 9.1 Casos de éxito 9.2 Casos de estudio	2	4
10	10. Simulaciones de dinámica molecular 10.1 Introducción a la dinámica molecular	1	2
Total de horas teóricas:		16	
Total de horas prácticas:		32	
Suma total de horas:		48	

Bibliografía básica actualizada:

- da Silva Rocha, S. F., Olanda, C. G., Fokoue, H. H., & Sant'Anna, C. M. (2019). Virtual screening techniques in drug discovery: review and recent applications. *Current topics in medicinal chemistry*, 19(19), 1751-1767. <https://doi.org/10.3390/jms20061375>
- Schaller, D., Šribar, D., Noonan, T., Deng, L., Nguyen, T. N., Pach, S., & Wolber, G. (2020). Next generation 3D pharmacophore modeling. *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*, 10(4), e1468. <https://doi.org/10.1002/wcms.1468>
- Stanzione, F., Giangreco, I., & Cole, J. C. (2021). Use of molecular docking computational tools in drug discovery. *Progress in Medicinal Chemistry*, 60, 273-343. <https://doi.org/10.1016/bs.pmch.2021.01.004>

Bibliografía complementaria:

- Zhou, P., Huang, J., & Tian, F. (2012). Specific noncovalent interactions at protein-ligand interface: implications for rational drug design. *Current medicinal chemistry*, 19(2), 226-238. <https://doi.org/10.2174/092986712803414150>
- de Freitas, R. F., & Schapira, M. (2017). A systematic analysis of atomic protein-ligand interactions in the PDB. *Medchemcomm*, 8(10), 1970-1981. <https://doi.org/10.1039/C7MD00381A>
- Daina, A., Michielin, O., & Zoete, V. (2017). SwissADME: a free web tool to evaluate pharmacokinetics, drug-likeness and medicinal chemistry friendliness of small molecules. *Scientific reports*, 7(1), 42717. <https://doi.org/10.1038/srep42717>
- Sunseri, J., & Koes, D. R. (2016). Pharmit: interactive exploration of chemical space. *Nucleic acids research*, 44(W1), W442-W448. <https://doi.org/10.1093/nar/gkw287>

Sugerencias didácticas:

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

Mecanismos de evaluación del aprendizaje de los alumnos:

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