



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



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

<b>Actividad académica con seriación antecedente:</b>
<b>Objetivo general:</b> Analizar conceptos fundamentales de quimioinformática y modelado molecular aplicados al estudio de compuestos con actividad biológica.
<b>Objetivos específicos:</b> 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.

<b>Índice temático</b>			
<b>Unidad</b>	<b>Tema</b>	<b>Horas</b>	
		<b>Teóricas</b>	<b>Prácticas</b>
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
<b>Total de horas teóricas:</b>		<b>48</b>	
<b>Total de horas prácticas:</b>		<b>0</b>	
<b>Suma total de horas:</b>		<b>48</b>	

<b>Contenido Temático</b>	
<b>Unidad</b>	<b>Tema y subtemas</b>
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> )

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

**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 )