



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

PROGRAMA DE ESTUDIOS

UNIDAD XOCHIMILCO		DIVISION CIENCIAS BIOLÓGICAS Y DE LA SALUD		1/ 4	
NOMBRE DEL PLAN MAESTRIA Y DOCTORADO EN CIENCIAS FARMACEUTICAS					
CLAVE	UNIDAD DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE		CREDITOS	12	
3366017	DISEÑO DE FARMACOS ASISTIDO POR COMPUTADORA		TIPO	OPT.	
H. TEOR. 6.0			TRIM.	I AL III	
H. PRAC. 0.0	SERIACION AUTORIZACION		NIVEL	MAESTRIA Y DOCTORADO	

OBJETIVO(S) :

OBJETO DE TRANSFORMACIÓN:

Diseño computacional de fármacos.

PROBLEMA EJE:

Diseño computacional de moléculas con actividad biológica dirigidas al bienestar del paciente.

OBJETIVO GENERAL:

Al final de la UEA el alumno será capaz de:

Aplicar los avances en la tecnología informática en el diseño y análisis de moléculas con actividad biológica.

OBJETIVOS PARCIALES:

Al final de la UEA el alumno será capaz de:

1. Aplicar los métodos computacionales en: cribado, análisis, diseño y optimización de moléculas con actividad biológica.
2. Definir los alcances y limitaciones de la aplicación de los métodos computacionales en el diseño de moléculas con actividad biológica.



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

APROBADO POR EL COLEGIO ACADEMICO
EN SU SESION NUM. 466

EL SECRETARIO DEL COLEGIO

CLAVE **3366017** **DISEÑO DE FARMACOS ASISTIDO POR COMPUTADORA****CONTENIDO SINTETICO:**

UNIDAD I. Diseño de Fármacos Asistido por Computadora (DiFAC)

1. Estrategias del DiFAC para el descubrimiento de nuevos fármacos.
2. Herramientas de modelado molecular.
 - 2.1. Minimización de energía y geometría molecular.
 - 2.2. Análisis conformacional.
 - 2.3. Cálculo de descriptores y propiedades moleculares.
 - 2.4. Paquetería disponible para modelado molecular.

UNIDAD II. Diseño basado en el ligando

1. Modelado por farmacóforo.
2. Similitud molecular.
 - 2.1. Huellas digitales moleculares.
 - 2.2. Medidas de similitud molecular.
3. Análisis de las bases de datos moleculares empleando quimioinformática.
 - 3.1. Espacio químico.
 - 3.2. Panoramas de actividad.
4. Relaciones cuantitativas estructura-actividad.
 - 4.1. Métodos 2D (Hansch y Free-Willson).
 - 4.2. Métodos 3D (Análisis Comparativo de Campos Moleculares).

UNIDAD III: Diseño basado en el receptor

1. Estructura y modelado de proteínas.
2. Modelado por homología.
3. Acoplamiento molecular (Docking).
4. Diseño basado en fragmentos.
5. Paquetería disponible para el diseño basado en el receptor.

MODALIDADES DE CONDUCCION DEL PROCESO ENSEÑANZA-APRENDIZAJE:

Este proceso se desarrollará a través de sesiones de presentación, análisis y discusión de problemas de la práctica profesional, apoyados en la literatura científica. Lo anterior se complementará con seminarios de actualización.

**UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA**APROBADO POR EL COLEGIO ACADEMICO
EN SU SESIÓN NUM. 466**EL SECRETARIO DEL COLEGIO**

CLAVE **3366017****DISEÑO DE FARMACOS ASISTIDO POR COMPUTADORA****MODALIDADES DE EVALUACION:**

Evaluación Global:

Los conocimientos adquiridos y las actividades realizadas se evaluarán con los siguientes elementos:

Evaluaciones objetivas (exámenes escritos) 40%

Participación en las sesiones grupales de discusión y análisis 30%

Habilidad para aplicar y transmitir los conocimientos adquiridos en la resolución de problemas específicos 30%

Total 100%

Evaluaciones objetivas: exámenes escritos.

Participación: personal y en grupos de discusión y análisis, mediante la presentación de seminarios y trabajos escritos.

Habilidad para aplicar y transmitir los conocimientos adquiridos en la resolución de problemas específicos: actividades que demuestren el desarrollo de las habilidades específicas en cada tema.

Para acreditar la UEA se requiere aprobar cada uno de los rubros mencionados con calificación mínima de S (suficiente).

BIBLIOGRAFIA NECESARIA O RECOMENDABLE:

BÁSICA

1. Bajorath, J. (2013). Chemoinformatics for drug discovery. 1a Edición. Editorial WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, Alemania.
2. Brown, N. (2015). In silico medicinal chemistry: Computational methods to support drug design. 1a Edición. Editorial Royal Society of Chemistry, Croydon, Reino Unido.
3. Kukol, A. (2008). Molecular modeling of proteins. Editorial Humana Press, Hatfield, Reino Unido.
4. Leach A.R. (2001). Molecular modelling: Principles and applications. 2a Edición. Editorial Pearson Patience Hall, Essex, Reino Unido.
5. Leach A.R. (2007). An introduction to cheminformatics, revised edition. Editorial Springer, Dordrecht, Países Bajos.
6. Oprea, T.I. (2005). Chemoinformatics in drug discovery. 1a Edición. Editorial WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, Alemania.
7. Stromgaard, K. Krogsgaard-Larsen, P. Madsen, U. (2017). Textbook of drug design and discovery. 5a Edición. Editorial CRC Press Taylor & Francis

**UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA**APROBADO POR EL COLEGIO ACADEMICO
EN SU SESION NUM. 1106**EL SECRETARIO DEL COLEGIO**

CLAVE **3366017** **DISEÑO DE FARMACOS ASISTIDO POR COMPUTADORA**

Group, Boca Ratón, FL, UEA.

8. Wermuth, C.G. (2015). The practice of medicinal chemistry. 4a Edición. Editorial Elsevier Academic Press, Londres, Reino Unido.

COMPLEMENTARIA

1. Ferreira, L.G. dos Santos, R.N. Oliva, G. Andricopulo, A.D. (2015). Molecular docking and structure-based drug design strategies. *Molecules*, 20, 13384-13421.
2. Kitchen, D.B. Decornez, H. Furr, J.R. y Bajorath, J. (2004). Docking and scoring in virtual screening for drug discovery: methods and applications. *Nature Reviews Drug Discovery* 3:935-949.
3. Medina-Franco, J.L. Fernandez-de Gortari, E. Naveja, J. (2015). Avances en el diseño de fármacos asistido por computadora. *Educación Química*. 26:180-186.
4. Prieto-Martínez, F.D. Arciniega, M. Medina-Franco, J.L. (2018). Molecular docking: current advances and challenges. *TIP Revista Especializada en Ciencias Químico-Biológicas*. 21:1-23.
5. Stumpfe, D. Bajorath, J. (2012). Methods for SAR visualization. *RSC Adv.*, 2:369-378.
6. Synergix Ltd. (2009). Molecular conceptor learning series. <http://www.drugdesign.com/web/home>.
7. Xu, J. Hagler, A. (2002). Chemoinformatics and drug discovery. *Molecules*. 7:566-600.

Publicaciones Periódicas

Journal of Chemical Information and Modelling, American Chemical Society.
Journal of Molecular Graphics and Modelling, Elsevier.
Journal of Computer-Aided Molecular Design, Springer.
Journal of Cheminformatics, Springer.
Molecular Informatics, Wiley.
Bioorganic & Medicinal Chemistry, Elsevier
European Journal of Medicinal Chemistry, Elsevier
Journal of Medicinal Chemistry, American Chemical Society.
Chemical Biology and Drug Design, Wiley.
ChemMedChem, Wiley.
MedChemComm, Royal Society of Chemistry.
Molecular Diversity, Springer.



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

APROBADO POR EL COLEGIO ACADÉMICO
EN SU SESIÓN NUM. 466

EL SECRETARIO DEL COLEGIO