

UNIDAD IZTAPALAPA		DIVISION CIENCIAS BASICAS E INGENIERIA		1 / 3	
NOMBRE DEL PLAN LICENCIATURA EN QUIMICA					
CLAVE	UNIDAD DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE DISEÑO DE FARMACOS			CRED.	9
2141111				TIPO	OPT.
H. TEOR. 3.0	SERIACION 2141097			TRIM. VIII-XII	
H. PRAC. 3.0					

OBJETIVO(S) :

Objetivo General:

Que al final de la UEA el alumno sea capaz de:

Conocer las técnicas y términos comúnmente utilizados en el campo del diseño de fármacos.

Objetivos Específicos:

Que al final de la UEA el alumno sea capaz de:

- Comprender algunos procedimientos comunes para seleccionar compuestos líder y sus derivados de mayor potencia.
- Analizar críticamente la literatura relacionada al diseño de fármacos.

CONTENIDO SINTETICO:

1. Introducción al diseño de fármacos. Métodos y terminología. Propiedades de los fármacos y Reglas de Lipinski. Afinidad, especificidad y constantes de unión.
2. Interacciones que median el reconocimiento fármaco-diana.
3. Diseño en base al ligando. Estructura electrónica y criterios de reactividad. Visualizadores, traslape de moléculas, índices de similitud, farmacóforo, búsqueda en bases de datos y generación de quimiotecas. Relaciones cuantitativas estructura-actividad (Análisis de Hansch, Análisis de Free-Wilson, etc.).



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

APROBADO POR EL COLEGIO
ACADEMICO
EN SU SESION NUM. 343

EL SECRETARIO DEL COLEGIO

[Handwritten signature]

CLAVE 2141111

DISEÑO DE FARMACOS

4. Diseño en base al receptor. El Banco de Datos de Proteínas (Protein Data Bank), algoritmos y estrategias para predecir sitios de unión, generación de conformeros, simulación del acoplamiento molecular (docking) y diseño de novo.
5. Análisis de complejos receptor-ligando. Estrategias de optimización de moléculas líder, derivados y análisis comparativos de campos moleculares (CoMFA).
6. Selección de dianas, descripción de tipos de dianas típicas (enzimas, canales, receptores, DNA) y de casos exitosos de diseño de fármacos.

MODALIDADES DE CONDUCCION DEL PROCESO DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE:

1. Las sesiones de teoría se realizarán por exposición de temas por parte del profesor y en ocasiones de los alumnos utilizando medios audiovisuales y auxiliados de esquemas y modelos moleculares. También se propiciarán sesiones de discusión de artículos y otros materiales.
2. Las sesiones de práctica incluyen visualización en computadora de moléculas y cálculos utilizando paquetería de cómputo, acceso a bases de datos y servidores de Internet.

MODALIDADES DE EVALUACION:

Evaluación Global:

- Dos evaluaciones periódicas como mínimo y, a juicio del profesor, una evaluación terminal.
- Participación en las sesiones con exposición de temas selectos.

Evaluación de Recuperación:

- El curso podrá acreditarse mediante una evaluación de recuperación que podrá ser global o complementaria a juicio del profesor.

BIBLIOGRAFIA NECESARIA O RECOMENDABLE:

1. Krogsgaard-Larsen, P., Liljefors, T., Madsen, U., Textbook of Drug Design



UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

APROBADO POR EL COLEGIO
ACADEMICO
EN SU SESION NUM. 342

EL SECRETARIO DEL COLEGIO

