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

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 con el 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 base de datos y generación de quimiotecas. Relaciones cuantitativas estructura-actividad (análisis de Hansch, análisis de Free-Wilson, etc.).

Casa abierta al tiempo
UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

ADECUACION
PRESENTADA AL COLEGIO ACADEMICO
EN SU SESION NUM. 420

EL SECRETARIO DEL COLEGIO

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 confórmeros, 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 base 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 and Discovery. 3a edición. CRC, 2002.

UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

Casa abierta al tiempo

ADECUACION
PRESENTADA AL COLEGIO ACADEMICO
EN SU SESION NUM. 420

EL SECRETARIO DEL COLEGIO

NOMBRE DEL PLAN	LICENCIATURA EN QUIMICA	3/ 3
CLAVE 2141111	DISEÑO DE FARMACOS	

2. Lipkowitz, K. B., Boyd, D. B., Eds., Reviews in Computational Chemistry, 1a edición. VCH Publishers, New York, Vol. 1-18. 1990-2002.
3. Ng, R., Drugs-From Discovery to Approval. 1a edición. Wiley-Liss, 2004.
4. Patrick, G. L., An Introduction to Medicinal Chemistry. 3a edición. Oxford University Press, 2006.
5. Silverman, R. B., The Organic Chemistry of Drug Design and Drug Action. 2a edición. Academic Press, 2004.
6. Smith, D. A., Van de Waterbeemd, H., Walker, D. K., Pharmacokinetics and Metabolism in Drug Design. 2a edición. Wiley-VCH, 2006.

Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

ADECUACION
PRESENTADA AL COLEGIO ACADEMICO
EN SU SESION NUM. 420

EL SECRETARIO DEL COLEGIO