

NOMBRE: Temas selectos de fisicoquímica teórica

CLAVE: 2146065

GRUPO: CO13E

HORAS TEORÍA: 4.5

NOMBRE DEL PROFESOR:

Annia Galano Jiménez (27642), cubículo R-105

Correo electrónico: annia.galano@gmail.com

HORARIO: Martes y jueves de 14:00 a 16:15.

HORARIO DE ASESORÍAS:

Martes y Jueves de 12:15 a 13:00 hrs

## OBJETIVOS

Que el alumno aprenda conceptos y estrategias generales del diseño racional de fármacos asistido por computadoras, así como el uso de protocolos ya establecidos para ello de manera práctica.

## CONTENIDO SINTÉTICO

### 1. INTRODUCCIÓN

- Conceptos básicos de Química medicinal y Diseño de fármacos.
- Etapas del desarrollo de fármacos.
- Historia: Inicios, éxitos, fracasos y serendipia.

### 2. ETAPAS DEL DISEÑO

- Identificación y validación de blancos.
- Descubrimiento del compuesto líder.
- Modificación y optimización del compuesto líder.
- Desarrollo del fármaco.

### 3. PROPIEDADES ADME

- Absorción.
- Distribución.
- Metabolismo.
- Excreción.
- Reglas de selección.

### 4. OTRAS PROPIEDADES

- Toxicidad

- Accesibilidad sintética

#### 5. USO PROTOCOLO CADMA-Chem

- Diseño de candidatos a fármaco a partir de un compuesto líder.
- Uso de herramientas QSAR, QSPR y acoplamiento molecular.
- Estimación de puntajes de selección.
- Estimación de descriptores de reactividad.
- Primera selección de candidatos.

#### MODALIDADES DE CONDUCCION DEL PROCESO DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE

Exposición oral por parte del profesor con auxilio de las técnicas audiovisuales idóneas.  
Presentación de temas y problemas por parte de los alumnos a través de seminarios.

#### MODALIDADES DE EVALUACION

Evaluaciones periódicas durante el curso. Presentación y discusión de proyectos realizados mediante el uso de las herramientas aprendidas.

#### BIBLIOGRAFIA

1. Richard B. Silverman y Mark W. Holladay, *The organic chemistry of drug design and drug action*. Academic Press, Elsevier, 2014.
2. Artículos especializados de investigación.



---

Annia Galano Jiménez