



DIFACQUIM



HO UNAM

PUBLICACIÓN DE ARTÍCULOS EN REVISTAS CIENTÍFICAS

Desde una perspectiva editorial

Dr. José Luis Medina Franco
Editor Asociado *RSC Advances*,
Journal of de Mexican Chemical Society
Comité Editorial *Molecular Diversity*

DIFACQUIM, Departamento de Farmacia
Facultad de Química, UNAM
medinajl@unam.mx

Taller de Escritura de Artículos Académicos en Inglés
UNAM Posgrado, Ciudad de México
22 de abril, 2016



CEPE
CENTRO DE ENSEÑANZA
PARA EXTRANJEROS



Diseño de Fármacos Asistido por Computadora en la Facultad de Química

DIFACQUIM

DIFACQUIM



HO UNAM

Grupo actual

Dr. Oscar Méndez Lucio

Postdoctorado

Eli Fernández de Gortari

Estudiante de Doctorado

Fernando Prieto Martínez

Estudiante de Maestría

Andrea Peña Castillo

Mariana González Medina

Jesús Naveja Romero

Hugo Vite Caritino

Estudiantes de licenciatura

Fernanda Saldívar

Servicio Social

Proyectos principales

Identificación de compuestos bioactivos

- UNAM - PAPIIT: Epigenetic compounds
- Dr. Daniel Chavez - CONACyT: HIV RT - AIDS

Desarrollo de material didáctico para la enseñanza de la Quimioinformática

UNAM - PAPIME

Diseño de fármacos

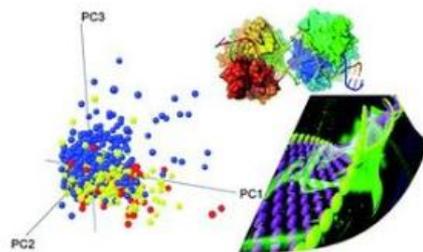
Laboratorios Senosiain SA de CV

Minería de datos - HTS

Mayo Clinic

Análisis computacional de productos naturales

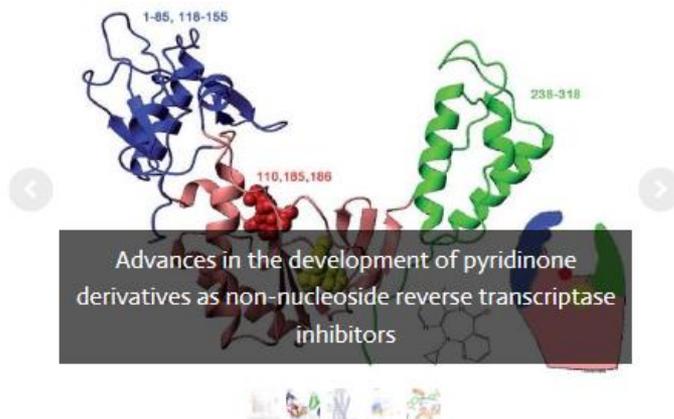
Facultad de Química, University of North Carolina



Bienvenido a DIFACQUIM

Diseño de fármacos asistido por computadora en la Facultad de Química

PUBLICACIONES RECIENTES



NOTICIAS

Abril 2016

[Innovation Match MX](#)

Plática: Diseño de Fármacos Asistido por Computadora: Inhibición de Dianas Epigenéticas

Impartida por: [Oscar Méndez](#)

Marzo 2016

[251st American Chemical Society National Meeting & Exposition](#)

[Pharmacophore modeling of non-nucleoside DNA methyltransferase inhibitors based on a chemoinformatic analysis.](#)

EVENTOS Y SEMINARIOS

[Curso "Academic Writing"](#)

Plática: Escritura de artículos científicos

Viernes 22 de abril, 16:30 - 18:00 hrs

Salón F-207, unidad de Posgrado, UNAM

Impartido por: [José L. Medina](#)



[ACS Webinar: Diseño de Fármacos por Computadora: Mitos, Realidades y algo más.](#)

27 de Abril a las 1-2pm

Registro libre [aquí](#)

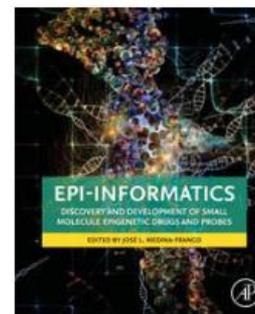
Impartido por: [José L. Medina](#)



ACS
Chemistry for Life®



LIBRO



[Epi-Informatics](#)

Discovery and Development of Small Molecule Epigenetic Drugs and Probes



Agenda

- Presentación y contenido del manuscrito
 - Título, resumen y palabras clave
 - Introducción, resultados y discusión
 - Conclusiones
 - Tablas y figuras
- Otros puntos relevantes
 - Agradecimientos
- Carta al editor (*cover letter*)
- Seguimiento y re-envío de manuscrito
 - Carta de respuesta al editor/revisores (*rebuttal letter*)
- Mensajes para llevar a casa ...

Escribir es un arte



Antoine-Laurent Lavoisier and his wife
Marie-Anne-Pierrette Paulze
Jacques Louis David

1788
The Metropolitan Museum of Art

La alta calidad científica debe reflejarse en la alta calidad del manuscrito:
gramática, estilo y presentación



Presentación y contenido del manuscrito

DIFACQUIM



- Incluir información solicitada en guía de autores
 - Carta al editor ← **Relevancia del trabajo**
 - Conclusiones clave (*highlights*)
 - *Perspectivas, resumen ejecutivo*
 - Resumen en español/inglés (si aplica)
- Uso de plantillas no siempre es indispensable
- Extensión del manuscrito de acuerdo al tipo de artículo (comunicación/carta, original, revisión)

Regla de oro: brevedad

Título del artículo

- Contacto principal con lectores
- Enunciar claramente el tema de estudio
- Preciso
- Atractivo
- Tan corto como sea posible

Reglas de oro:

- Menor a 15 palabras
- Evitar abreviaturas
- Evitar palabras ambiguas: *some, best, new, the study of*, etc.

Resumen

Abstract

- Breve
 - Menor a 150 ó 200 palabras (ver guía de autores)
- Contiene:
 - ¿Qué se hizo? - **Objetivo**
 - ¿Para qué? - **Significancia**
 - ¿Cómo? - **Estrategia**
 - ¿Qué se obtuvo? - **Conclusiones**
- **Atractivo** (pero no exagerado)
 - Datos deben apoyar conclusiones
- En general, no incluir referencias y abreviaturas

Regla de oro: frases cortas con gramática impecable

Resumen estructurado

Ejemplo

La guía de autores
solicita dividir el
resumen en secciones

Activity landscape of DNA methyltransferase inhibitors bridges chemoinformatics with epigenetic drug discovery

J Jesús Naveja & José L Medina-Franco[†]

[†]Universidad Nacional Autónoma de México, Departamento de Farmacia, Mexico City, México

Introduction: Activity landscapes are valuable tools for exploring systematically the structure–activity relationships (SAR) of chemical databases. Their application to analyze the SAR of DNA methyltransferase (DNMT) inhibitors, which are attractive compounds as potential epi-drugs or epi-probes, provides useful information to identify pharmacophoric regions and plan the development of predictive models and virtual screening.

Areas covered: This paper highlights different approaches for conducting SAR analysis of datasets with a particular focus on the activity landscape methodology. SAR information of DNMT inhibitors (DNMTi), stored in a public database, is surveyed to further illustrate concepts and generalities of activity landscape modeling with a special emphasis on structure–activity similarity (SAS) maps.

Expert opinion: The increasing SAR information reported for DNMTi opens up avenues to implement activity landscape methods. Despite several activity landscape methods, such as SAS maps, being well established, these need further refinement. For instance, novel combinations of multiple representations, such as the addition of Z-values of similarity (fusion-Z), lead to more robust representations of consensus SAS maps. Density SAS maps improve the visualization of the SAR. A survey of activity cliffs (i.e., pairs of compounds with high structural similarity but high differences in potency) of DNMTi available in a public database suggest that it is feasible to develop predictive models for non-nucleoside DNMTi using approaches such as quantitative structure–activity relationships and that non-nucleoside DNMTi in ChEMBL can be used as query molecules in similarity-based virtual screening.

Keywords: activity cliffs, cancer, data mining, DNA methyltransferase, epi-informatics, structure–activity relationships

Expert Opin. Drug Discov. (2015) 10(10):1059-1070

Introducción

- Breve: contexto necesario para entender la problemática y relevancia trabajo
 - No hacer revisiones completas del tema
- Flujo lógico; mencionar:
 - Problemática
 - ¿Qué se ha hecho?, ¿cuál es el avance en el campo de investigación?
Incluir referencias relevantes
 - ¿Qué falta por hacer?
 - ¿Qué se está haciendo en el artículo? Enunciar el **objetivo**
 - ¿Cuál es la hipótesis y estrategia para alcanzar el objetivo?

Regla de oro: comenzar el último párrafo con el objetivo

Introducción

ChemMedChem 2014, 9, 560 – 565

The goal of this work was to identify a novel hypomethylating compound. To measure the hypomethylating activity of this identified compound, we used a cell-based screen that is highly tractable, internally controlled, and well-suited for drug a repurposing strategy in epigenetics.

RSC Adv., 2015, 5, 63882–63895

In this work, we report a chemoinformatic-based characterization of the SAR of a dataset of 280 compounds tested as IDNMT1 and deposited in ChEMBL. The analysis had three specific aims: (a) characterization of the structural diversity and distribution in chemical space of the data set; (b) descriptive SAR analysis using the concept of activity landscape modeling and (c) structure-based interpretation of the activity cliffs. To

Mol Divers (2014) 18:599–610

The goal of the present study was to explore the permeability landscape of 100 drugs known to be passively transported across the Caco-2 cell membrane. In contrast to common quantitative predictive models, the current approach is focused on the systematic description of the property landscape to characterize structure - Caco-2 permeability relationships. In QSAR studies, it is known that the presence of

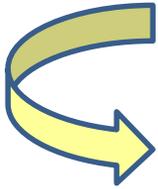
Métodos

Materials and Methods / Experimental Section

- Detallada
 - Información suficiente para reproducir el trabajo
 - Fundamentar las conclusiones
- Lógica y estructurada
- **Recomendación:** para metodologías elaboradas usar diagrama de flujo
- Métodos conocidos: incluir citas
- Métodos nuevos: detallados
- Indicar medida exactas
- Pruebas estadísticas
- Para redactar ...
 - Tiempo pasado
 - Tercera persona

Resultados

- Claros
- Secuencia lógica (flujo igual o similar a métodos)
- Acoplados con tablas y figuras



Tablas y figuras

- Contenido esencial en cada tabla y figura
- Selección de tablas y figuras clave para texto principal
 - Incluir adicionales en material suplementario
- Deben entenderse sin necesidad de leer el texto

Regla de oro:

El manuscrito debería entenderse viendo tablas y figuras

Discusión

- Interpretación de datos
 - Fundamentar con hechos medibles
- Enfatizar relevancia
- Relacionar con información conocida (incluir referencias)
- Indicar claramente la asociación con el objetivo del trabajo

Conclusiones

- Breves
- No repetir resumen
- Indicar: ¿se alcanzó el objetivo?
- Enfatizar la **significancia** de los resultados
- Indicar perspectivas
 - En sección independiente (ver guía de autores)

Regla de oro:

Anticiparse a comentarios de revisores (ej. posibles perspectivas)

Referencias

- Relevantes
- Actualizadas
- Auto-citas relevantes son apropiadas (no excesivas)
- Formato uniforme y requerido en guía de autores

Agradecimientos

- A personas por:
 - Discusiones, opiniones, sugerencias, etc.
 - Lectura, edición, corrección de manuscrito (*proof-reading*)
 - Préstamo o donación de equipo, material, insumos, etc.
- A instituciones: fuentes de financiamiento (proyectos, becas)



Carta al Editor

Cover letter

DIFACQUIM



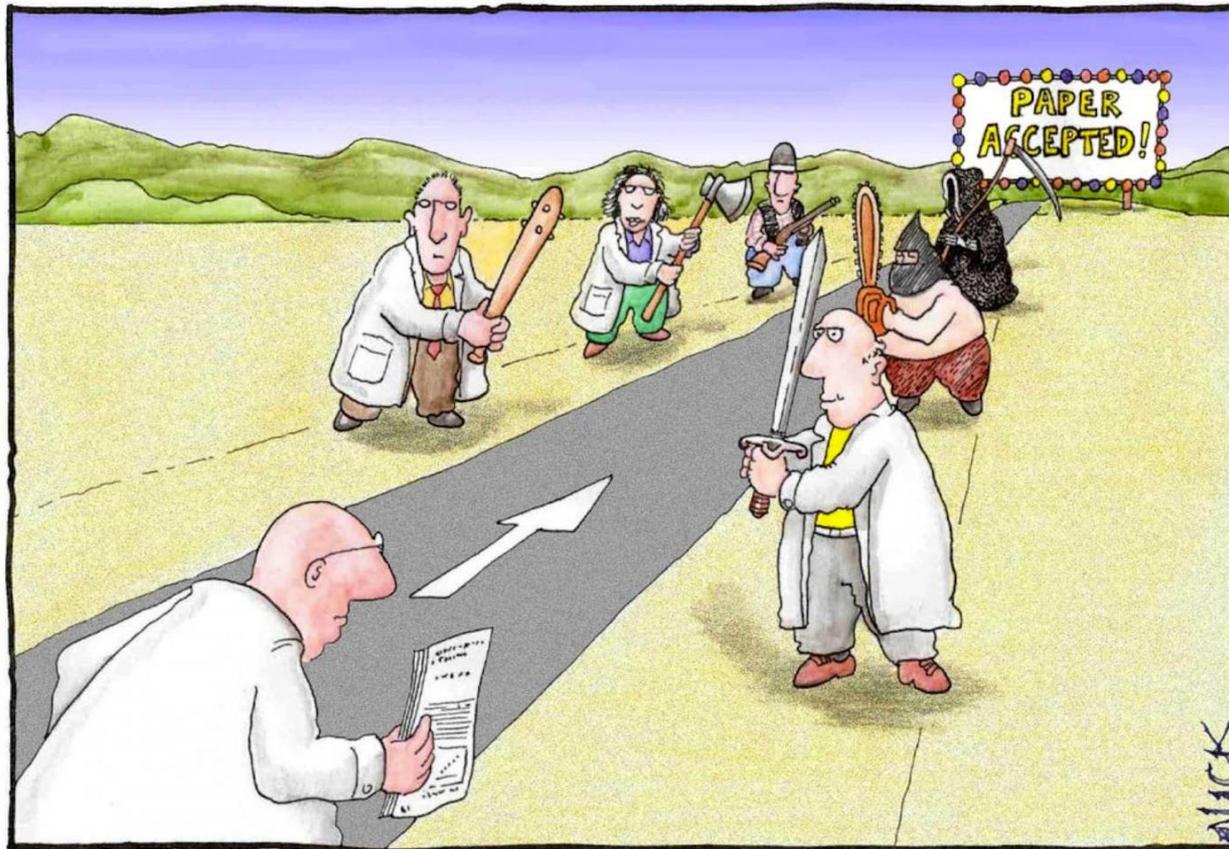
HO UNAM

- Indicar **significancia** y **novedad** del trabajo
- Tipo de artículo (original, carta, revisión, etc.)
- Revisores sugeridos*
- Otra información solicitada en guía de autores

Regla de oro: no repetir resumen

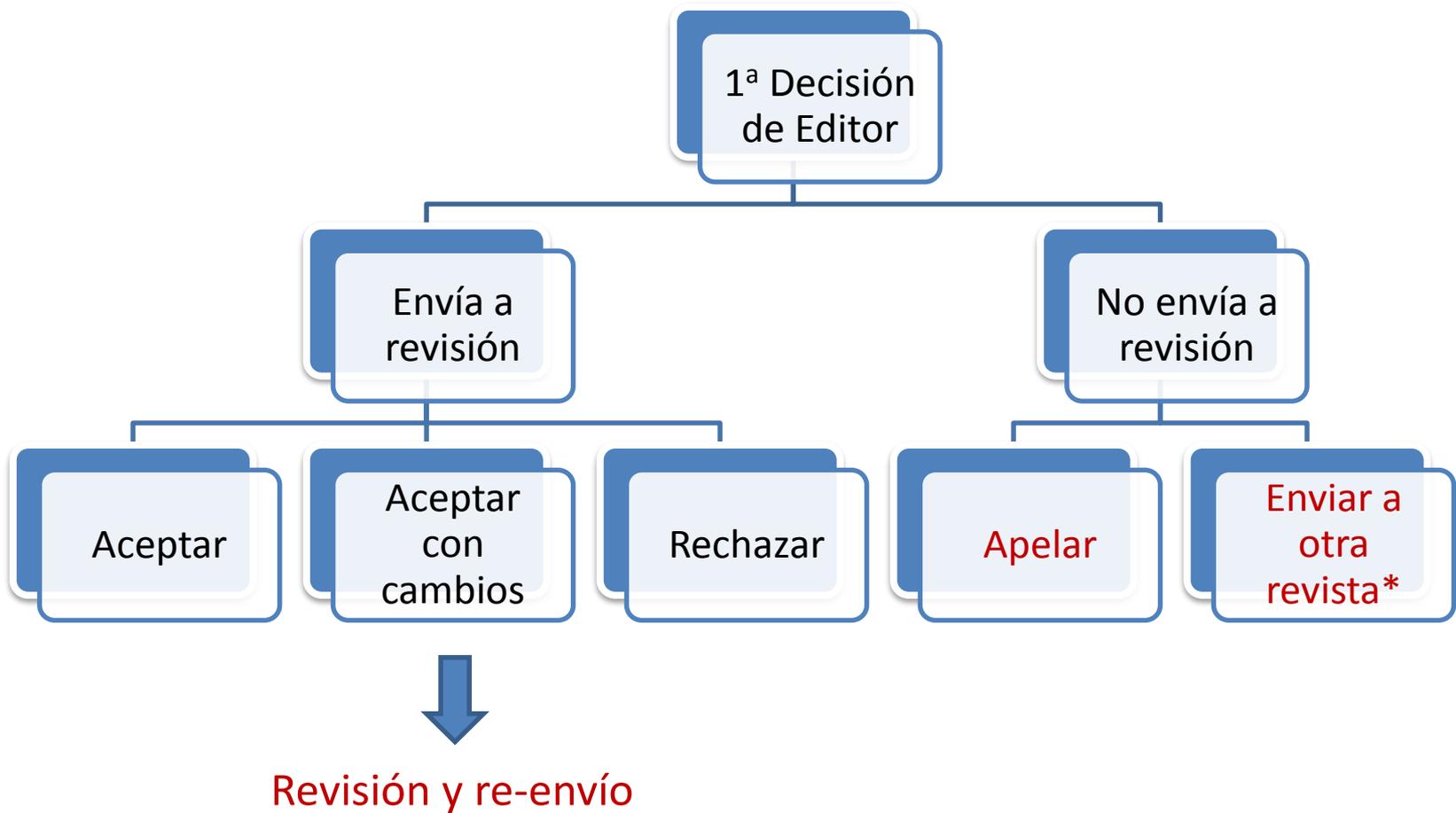
Seguimiento y re-envío de manuscrito

Autores vs. revisores



Most scientists regarded the new streamlined peer-review process as “quite an improvement.”

Toma de decisiones



Comentarios del editor y revisores

- Considerar: los revisores darán comentarios basados en:
 - Conocimiento
 - Experiencia
 - Opinión ← **Componente subjetivo**
- Enfocarse en los comentarios objetivos (no subjetivos)
- ¿Qué sugerencia(s) hay que implementar para mejorar el artículo?
- Que comentarios están relacionados con deficiencias de presentación del manuscrito: frases, tablas, figuras, etc.

Regla de oro: leer los comentarios más de una vez

Carta de respuesta a comentarios

Rebuttal letter

- Agradecer a revisores por retroalimentación y tiempo
- Respuesta desglosada a cada comentario (objetivo)
- No es obligatorio estar de acuerdo con todos los puntos
 - El revisor pudo no entender el texto, no leyó con cuidado el manuscrito, tiene una opinión diferente
 - Fundamentar desacuerdo (con referencias, datos)
 - Clarificar concepto en texto (refrasear)
 - Sugerencias razonables de estudios a futuro: agregar como perspectivas
 - Ser cortés (*polite*)

Reglas de oro:

- Respuestas breves, directas y fáciles de identificar para el editor
- Marcar en texto revisado cambios hechos al manuscrito



PARA LLEVAR A CASA ...

- Primera evaluación del editor:
 - Título y resumen
 - Conclusiones, tablas y figuras
- Enfatizar:
 - Novedad y significancia
 - Métodos robustos que soportan a las conclusiones
- “Alta calidad científica debe reflejarse en alta calidad del manuscrito”

Reglas de oro:

- Calidad y perseverancia
- “La belleza está en el detalle”



¡GRACIAS!

Diapositivas y otros recursos disponibles en
www.difacquim.com/educación/redacción-de-artículos

Seminario: Redacción de artículos científicos
Seminario de Doctorado, Posgrado en Ciencias Químicas

José L. Medina Franco
medinajl@unam.mx

Diseño de Fármacos Asistido por Computadora en la Facultad de Química
www.difacquim.com