



Elaboración de un manual teórico-práctico de quimioinformática

Fernanda I. Saldivar González, Mariana González Medina, José L. Medina Franco

DIFACQUIM, Cubículos 305 y 108, Edificio F, Facultad de Química (UNAM)

Teléfono: 56223899, ext. 44458

felilang_12@hotmail.com, medinajl@unam.mx



Introducción

La 'quimioinformática' es una herramienta que surge de la combinación de recursos informáticos y los datos químicos y se emplea en el manejo, visualización y análisis sistemático de información química [1]. Esta disciplina puede aplicarse a diferentes áreas de estudio, sin embargo, es en la Química Farmacéutica donde se la asocia con frecuencia, ya que es de gran ayuda en el descubrimiento, diseño y desarrollo de compuestos bioactivos.

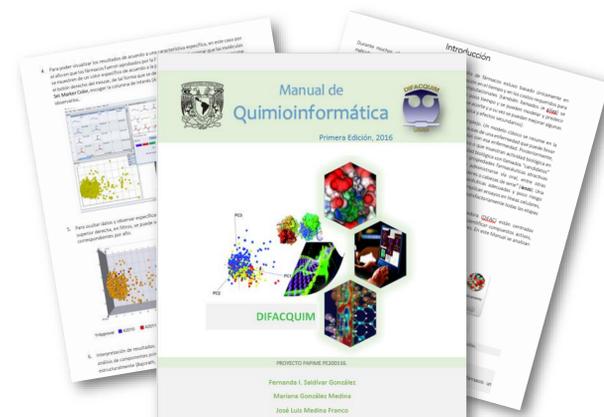
Con el objetivo de fortalecer la enseñanza y difusión de los conceptos y métodos fundamentales en quimioinformática, se elaboró un manual teórico-práctico, que incluye ejercicios con enfoques actuales para fomentar el interés de los alumnos de la licenciatura Química Farmacéutica Biológica hacia esta disciplina.

Justificación

La enseñanza de las bases teóricas de la quimioinformática aplicada a la Química Farmacéutica es escasa y en ocasiones temas de relevancia quedan fuera de los contenidos de cursos actuales de licenciatura. Esto se debe en parte a la cantidad limitada de libros de texto especializados en esta área y a que la literatura en español sobre quimioinformática es aún más restringida.

La implementación de métodos quimioinformáticos en Química Farmacéutica es de suma importancia para sentar las bases del diseño racional de nuevos fármacos.

Contenido



5 Capítulos

- Capítulo 1. Bases de datos: Bibliotecas de compuestos químicos
- Capítulo 2. Espacio químico
- Capítulo 3. Relaciones cuantitativas estructura-actividad
- Capítulo 4. Acoplamiento molecular automatizado
- Capítulo 5. Toxicología informática

- Objetivo General
- Objetivos específicos
- Introducción (conceptos más importantes)
- Procedimiento
- Ejercicios prácticos
- Evaluación corta

Mediante artículos científicos donde se utilizan más de un método quimioinformático

Ejercicios finales (Integrativos)

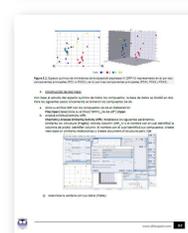
Resultados

¿Qué podrán aprender en cada capítulo?



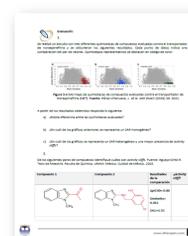
Cap. 1

Realizar búsquedas de información en bases de datos usadas con frecuencias en la investigación de fármacos de una forma sencilla y eficiente. Construir bases de datos e identificar moléculas que puedan interferir en cálculos computacionales



Cap. 2

Identificar los diferentes tipos de descriptores moleculares y su utilidad. Obtener perfiles de las bases de datos generadas mediante métodos de visualización.



Cap. 3

Llevar a cabo la optimización de la actividad biológica de compuestos activos y la identificación sistemática de acantilados de actividad (en inglés, *activity cliffs*)

Cap. 4

Identificar los requisitos en cuanto a la presentación del ligando y de la diana biológica establecidos por diferentes herramientas para realizar acoplamiento molecular.

Cap. 5

Conocer diferentes bases de datos con información relacionada a la toxicología de sustancias químicas. *Identificar compuestos con bajo riesgo toxicológico y seleccionar candidatos para la optimización y desarrollo de fármacos potenciales.



Manual disponible en: www.difacquim.com/educación

Conclusiones

La quimioinformática es una disciplina científica que ha surgido en respuesta a la necesidad de manejar, clasificar e interpretar en forma eficiente información química, una de sus grandes aplicaciones ha sido en el desarrollo de fármacos, ya que permite el manejo de grandes cantidades de datos y la predicción de la actividad biológica.

La enseñanza de esta disciplina a estudiantes cuya orientación es la Química Farmacéutica puede contribuir a fomentar el interés hacia las técnicas computacionales empleadas en el diseño y desarrollo de nuevos fármacos. También puede ayudar a priorizar y racionalizar los costos del desarrollo de diversos fármacos.

Referencias

- Saldivar-González F, Prieto-Martínez FD; Medina-Franco JL. Descubrimiento y desarrollo de fármacos: un enfoque computacional. *Educación Química* 2016, <http://dx.doi.org/10.1016/j.eq.2016.06.002>.
- Medina-Franco JL, Fernández-de-Gortari E, Naveja JJ. Avances en el diseño de fármacos asistido por computadora. *Educación Química* 2015, 26, 180-186.

Agradecimientos

- Programa de Apoyo a Proyectos para la Innovación y Mejoramiento de la Enseñanza (PAPIME) PE200116. Se agradecen comentarios y sugerencias del grupo DIFACQUIM en especial al QFI. Fernando Prieto Martínez y Dr. Oscar Méndez Lucio.

