



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE QUÍMICA



1 de 6

PROGRAMA INTRODUCCIÓN A LA QUIMIOINFORMÁTICA

Clave 0000	Créditos 6	Semestre 8/9	Ciclo TERMINAL Y DE ESPECIALIZACIÓN					
Modalidad de la Asignatura	Curso	<input checked="" type="checkbox"/>	Área/Bloque		Departamento			
	Taller	<input type="checkbox"/>	FARMACIA		FARMACIA			
	Laboratorio	<input type="checkbox"/>						
	Seminario/Estancia	<input type="checkbox"/>						
Tipo de Asignatura	Teórica	<input checked="" type="checkbox"/>	Experimental	<input type="checkbox"/>	Práctica/Problemas	<input type="checkbox"/>	Teórico/Práctica	<input type="checkbox"/>
Carácter de la Asignatura	Obligatoria	<input type="checkbox"/>	Horas/semana Teóricas 3 Prácticas/Problemas					
	Optativa	<input checked="" type="checkbox"/>	Horas Totales Semana 3. Semestre 48					

Seriación Precedente	Ninguna <input checked="" type="checkbox"/>	Seriación Subsecuente	Ninguna <input checked="" type="checkbox"/>
Asignatura(s)	Obligatoria	Indicativa	Asignatura(s)
	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	
	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	

Observaciones:

Objetivo General:

Conocer, discutir y aplicar conceptos de quimioinformática, así como sus tendencias actuales en investigación, aplicados al estudio de compuestos con actividad biológica.

Objetivos Específicos:

- Conocer los alcances y limitaciones de métodos computacionales empleados comúnmente en el estudio de compuestos con actividad biológica.
- Reconocer las semejanzas y diferencias fundamentales entre quimioinformática, bioinformática, química teórica y modelado molecular.
- Conocer y utilizar diversos métodos quimioinformáticos que se emplean en el descubrimiento y desarrollo de candidatos a fármacos y nutraceuticos.

ÍNDICE TEMÁTICO

No.	Temas	Horas / semestre	
		Teóricas	Prácticas
1	Introducción al Diseño de Fármacos Asistido por Computadora (DiFAC).	6	
2	Quimioinformática, bioinformática, química teórica y modelado molecular: semejanzas y diferencias.	3	
3	Quimioinformática: conceptos básicos en la investigación de compuestos bioactivos.	12	
4	Evaluación computacional de bases de datos moleculares (virtual screening).	9	



ÍNDICE TEMÁTICO

No.	Temas	Horas / semestre	
		Teóricas	Prácticas
5	Estudio computacional de relaciones estructura-actividad (SAR).	9	
6	Tendencias actuales de la quimioinformática en desarrollo de fármacos: tópicos selectos.	9	
Subtotales		48	
Horas Totales		48	

CONTENIDO TEMÁTICO

Temas y Subtemas

- 1. Introducción al Diseño de Fármacos Asistido por Computadora (DiFAC).**
 - 1.1. Introducción al descubrimiento y desarrollo de fármacos.
 - 1.2. Objetivos y estrategias del DiFAC.
 - 1.3. Métodos comunes empleados en DiFAC.
 - 1.4. Casos exitosos del DiFAC.
- 2. Quimioinformática, bioinformática, química teórica y modelado molecular: semejanzas y diferencias.**
 - 2.1. Concepto de *química computacional*.
 - 2.2. Definiciones de *quimioinformática* e historia breve de esta disciplina.
 - 2.3. Concepto de *bioinformática* y su relación con *quimioinformática*.
 - 2.4. *Química teórica* y *modelado molecular*: semejanzas y diferencias con *quimioinformática*.
 - 2.5. Introducción a la aplicación de quimioinformática a áreas de química más allá de farmacia (química de alimentos, síntesis orgánica, química de materiales, y química analítica).
 - 2.6. Introducción a *software* de libre acceso y servidores públicos para hacer cálculos quimioinformáticos.
 - 2.6.1. Datawarrior.
 - 2.6.2. Platform for Unified Molecular Analysis (PUMA).
 - 2.6.3. Activity Landscape Plotter.
 - 2.6.4. Consensus Diversity Plots.
- 3. Quimioinformática: conceptos básicos en la investigación de compuestos bioactivos.**
 - 3.1. Bases de datos moleculares: conocimiento y minería (*data mining*).
 - 3.1.1. Colecciones públicas anotadas con actividad biológica. ChEMBL, PubChem.
 - 3.1.2. Bibliotecas públicas para la búsqueda de compuestos con actividad biológica: ZINC.
 - 3.1.3. Bases de datos de productos naturales.
 - 3.1.4. Bases de datos de compuestos presentes en alimentos como fuente de compuestos bioactivos.
 - 3.2. Representación molecular: bases teóricas y métodos de cálculo.
 - 3.2.1. Huellas digitales moleculares.
 - 3.2.2. Subestructuras y núcleos estructurales base (andamios moleculares o *scaffolds*).
 - 3.2.3. Propiedades fisicoquímicas.
 - 3.3. Espacio químico.
 - 3.3.1. Concepto y usos en la investigación en fármacos.
 - 3.3.2. Métodos de visualización.
 - 3.4. Similitud molecular.
 - 3.4.1. Concepto y tipos de similitud.
 - 3.4.2. Índices para cuantificar la similitud molecular.
- 4. Evaluación computacional de bases de datos moleculares (virtual screening).**



CONTENIDO TEMÁTICO

Temas y Subtemas

- 4.1. Etapas fundamentales del cribado virtual.
- 4.2. Filtrado de bases de datos moleculares.
- 4.3. Elección de métodos computacionales para hacer el cribado virtual.
- 4.4. Búsqueda por similitud molecular.
- 4.5. Análisis y selección de *hits* computacionales.
- 5. Estudio computacional de relaciones estructura-actividad (SAR).**
 - 5.1. Importancia y tipos de estudios cuantitativos de relaciones estructura-actividad.
 - 5.1.1. Objetivos de un estudio cuantitativo: análisis retrospectivos y prospectivos.
 - 5.1.2. Métodos basados en regla y modelos de clasificación.
 - 5.1.3. Métodos con actividad biológica en escala continua.
 - 5.2. Descriptores moleculares.
 - 5.3. Estudios cuantitativos en una, dos y tres dimensiones (2D-QSAR, 3D-QSAR).
 - 5.3.1. Modelo de Hansch.
 - 5.3.2. CoMFA, CoMSIA.
 - 5.3.3. Métodos de aprendizaje de máquina (*machine learning*).
 - 5.4. Panoramas de actividad (*activity landscape*).
 - 5.4.1. Concepto y métodos.
 - 5.4.2. 'Acantilados de actividad' (*activity cliffs*): identificación, cuantificación e interpretación.
 - 5.4.3. *Scaffold hops*.
- 6. Tendencias actuales de la quimioinformática en desarrollo de fármacos: tópicos selectos.**
 - 6.1. Quimiogenómica computacional.
 - 6.2. Análisis computacional de *big data*.
 - 6.3. Predicción de propiedades ADME/Tox.
 - 6.4. Quimioinformática en el reposicionamiento de fármacos asistido por computadora.
 - 6.5. Aplicaciones de quimioinformática en la investigación en enfermedades desatendidas.
 - 6.6. Búsqueda sistemática de compuestos encontrados en alimentos como compuestos bioactivos.
 - 6.7. Quimioinformática y desarrollo de fármacos a partir de productos naturales.
 - 6.8. Áreas de aplicación de quimioinformática en Química Farmacéutica Inorgánica.

ESTRATEGIAS DIDÁCTICAS GENERALES

Exposición	<input checked="" type="checkbox"/>	Aprendizaje por Proyectos	<input type="checkbox"/>
Trabajo en Equipo	<input checked="" type="checkbox"/>	Aprendizaje Basado en Problemas	<input checked="" type="checkbox"/>
Lecturas	<input checked="" type="checkbox"/>	Aprendizaje Basado en Casos	<input type="checkbox"/>
Trabajo de Investigación	<input checked="" type="checkbox"/>	Juego de roles	<input type="checkbox"/>
Prácticas (Campo, Taller, Problemas, Laboratorio)	<input type="checkbox"/>	Seminarios, debates, panel de discusión	<input type="checkbox"/>
Simulaciones	<input type="checkbox"/>	Visitas Industriales	<input type="checkbox"/>

Otras (especificar):

ESTRATEGIAS DIDÁCTICAS TECNOLÓGICAS

Uso de software especializado	<input checked="" type="checkbox"/>	Foros electrónicos	<input type="checkbox"/>
Mapas mentales o conceptuales	<input type="checkbox"/>	Aulas virtuales	<input type="checkbox"/>
Eventos virtuales vía <i>Streaming</i>	<input type="checkbox"/>	WebQuest	<input type="checkbox"/>
Blogs	<input type="checkbox"/>	Uso de TICs	<input type="checkbox"/>
Infografías	<input type="checkbox"/>	Video tutoriales	<input checked="" type="checkbox"/>



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE QUÍMICA



4 de 6

ESTRATEGIAS DIDÁCTICAS TECNOLÓGICAS

Otras (especificar): Software especializado de acceso libre (ejemplo: DataWarrior) y servidores públicos para hacer cálculos en línea (ejemplos: PUMA, Activity Landscape Plotter y Consensus Diversity Plots).

EVALUACIÓN DEL APRENDIZAJE

Exámenes Parciales	<input checked="" type="checkbox"/>	Rúbricas	<input type="checkbox"/>
Examen Departamental	<input type="checkbox"/>	Portafolio de Evidencias	<input type="checkbox"/>
Examen Final	<input checked="" type="checkbox"/>	Lista de Cotejo	<input type="checkbox"/>
Trabajos y Tareas	<input checked="" type="checkbox"/>	Proyecto	<input type="checkbox"/>
Presentación de Tema	<input checked="" type="checkbox"/>	Bitácora	<input type="checkbox"/>
Participación en Clase	<input checked="" type="checkbox"/>	Protocolo	<input type="checkbox"/>
Asistencia	<input checked="" type="checkbox"/>	Carteles	<input type="checkbox"/>
Otras (especificar):			



PERFIL PROFESIOGRÁFICO

Título o Grado	Químico Farmacéutico Biólogo o Químico, preferentemente con posgrado y experiencia en la aplicación de métodos quimioinformáticos en el desarrollo de fármacos.
Experiencia Docente (especificar tiempo y nivel requeridos)	En la enseñanza de quimioinformática, preferentemente con un año de experiencia docente en licenciatura y/o posgrado.
Otra Característica	De preferencia con experiencia en participación en proyectos de investigación multidisciplinarios.

BIBLIOGRAFÍA

Bibliografía Básica:

1. Gasteiger J, Engel T. (2018) Chemoinformatics: Basic Concepts and Methods. Weinheim, Germany: Wiley VCH.
2. Varnek A. Ed. (2017) Tutorials in Chemoinformatics. Weinheim, Germany: Wiley VCH.
3. Bajorath J. Ed. (2014) Chemoinformatics for Drug Discovery. Hoboken, New Jersey, USA: Wiley.
4. Leach AR, Gillet VJ (2007) An Introduction to Chemoinformatics. Dordrecht, The Netherlands: Springer.
5. Saldívar González F, Hernández Luis F, Lira Rocha A, Medina Franco JL. (2017) Manual de Quimioinformática. Universidad Nacional Autónoma de México. 1a edición. Ciudad de México, México.

Bibliografía Complementaria:

1. Gasteiger J, Engel T. (2018) Applied Chemoinformatics: Achievements and Future Directions. Weinheim, Germany: Wiley VCH.
2. Alvarez J, Shoichet, B. (2005) Virtual Screening in Drug Discovery. Boca Raton, Florida, USA: Taylor and Francis.
3. Gasteiger J, Engel T. (2003) Chemoinformatics: A Textbook. Weinheim, Germany: Wiley VCH.
4. Schleyer PvJ. Ed. (1998) Encyclopedia of Computational Chemistry. New York, USA: Wiley.
5. Duffy BC et al. (2012) Early phase drug discovery: Cheminformatics and computational techniques in identifying lead series. Bioorg Med Chem 20:5324-5342.
6. Roy K. Ed. (2017) Advances in QSAR Modeling. Springer International Publishing AG.
7. Stumpfe D, Hu Y, Dimova D, Bajorath J (2014) Recent progress in understanding activity cliffs and their utility in medicinal chemistry. J Med Chem 57: 18-28.
8. Maggiora G, Vogt M, Stumpfe D, Bajorath J (2014) Molecular similarity in medicinal chemistry. J Med Chem 57: 3186-3204.
9. Medina-Franco JL, Naveja JJ, López-López E (2019) Reaching for the bright StARs in chemical space. Drug Discovery Today 24: 2162-2169.
10. Martinez-Mayorga K, Madariaga-Mazon A, Medina-Franco JL, Maggiora G. (2020) The impact of chemoinformatics on drug discovery in the pharmaceutical industry. Expert Opin Drug Discov. 15:293-306.
11. López-López E. Bajorath J, Medina-Franco JL. (2021) Informatics for chemistry, biology, and biomedical Sciences. J Chem Inf Model. 61:26-35.



ATRIBUTOS QUE APORTA LA ASIGNATURA AL PERFIL DE EGRESO

- | | |
|---|---|
| <input checked="" type="checkbox"/> Capacidad para aplicar conocimiento y comprensión a la solución de problemas cualitativos y cuantitativos | <input checked="" type="checkbox"/> Conocimiento del inglés para leer, escribir y exponer documentos, así como comunicarse con otros especialistas |
| <input checked="" type="checkbox"/> Comprender conceptos, principios y teorías fundamentales y su aplicación a las tecnologías apropiadas | <input type="checkbox"/> Conocimiento, aplicación, asesoramiento sobre el marco normativo para la toma de decisiones y de gestión de proyectos |
| <input checked="" type="checkbox"/> Interpretar y evaluar datos derivados de observaciones y mediciones relacionándolos con la teoría | <input type="checkbox"/> Habilidad para la presentación de información técnico-científica ante diferentes audiencias tanto en forma oral como escrita |
| <input checked="" type="checkbox"/> Capacidad para reconocer y analizar problemas y planificar estrategias para su solución | <input type="checkbox"/> Aplicar la relación estructura-propiedades-comportamiento-procesamiento |
| <input type="checkbox"/> Habilidad para desarrollar, utilizar y aplicar técnicas analíticas | <input type="checkbox"/> Dominio de las buenas prácticas de laboratorio y de documentación |
| <input checked="" type="checkbox"/> Conocimiento y comprensión en profundidad de un área específica | <input type="checkbox"/> Conocimiento de las principales rutas sintéticas en Química |
| <input checked="" type="checkbox"/> Conocimiento de las diversas áreas de investigación y desarrollo | <input type="checkbox"/> Habilidad para aplicar los conocimientos en el desarrollo sostenible |
| X Habilidad para participar en equipos de trabajo inter y transdisciplinarios relacionados | <input type="checkbox"/> Conocimiento de otras disciplinas científicas que permitan la comprensión de la Química |
| <input checked="" type="checkbox"/> Habilidad en el uso de las técnicas modernas de la informática y comunicación aplicadas | <input type="checkbox"/> Desarrollar, diseñar, coordinar y gestionar proyectos |
| <input checked="" type="checkbox"/> Abstracción espacial y representación gráfica | <input type="checkbox"/> Emplear técnicas de control de calidad |
| <input type="checkbox"/> Modelar y simular sistemas y procesos | <input type="checkbox"/> Administrar los recursos materiales y equipos |
| <input type="checkbox"/> Dirigir y liderar recursos humanos | <input type="checkbox"/> Evaluar el impacto ambiental |