



Métodos de Modificaciones Estructurales

1. Datos generales de la asignatura		
Clasificación: Tópico Selecto		
Clave:		
No. de Créditos: 9		
2. Presentación		
El siguiente programa de Métodos de modificaciones estructurales, se encuentra dirigido a estudiantes de posgrado en el área químico-biológica como herramienta clave hacia el cumplimiento de los numerosos requisitos tan estrictos que en cualquier molécula terapéutica potencial se debe cumplir, así como los desafíos y enfoques involucrados en encontrar estructuras moleculares que se incorporan a un objetivo biológico, y las múltiples facetas de la síntesis química que conectan la síntesis inicial en laboratorio (pequeña escala), con la evolución de un proceso para una producción comercial exitosa (escala industrial).		
3. Participantes en el diseño y seguimiento curricular del programa		
Lugar y fecha de elaboración o revisión	Participantes	Observaciones
Zacatecas, Zac., a 2 de julio del 2018	Dr. Hiram Hernández López Dr. Gerardo Martínez Guajardo	
4. Competencias a desarrollar		
A. Competencia general de la asignatura		
Desarrollar un pensamiento crítico para comprender y reconocer las modificaciones químicas que permitan encontrar estructuras moleculares cumplan con las expectativas biológicas, así como diseñar una ruta de síntesis que permita la obtención de farmacóforos con potencial actividad biológica.		
B. Competencias específicas		
a) Saber cómo realizar el proceso de búsqueda para el descubrimiento de nuevos fármacos b) Saber cómo hacer uso de la tecnología <i>in silico</i> que permita optimizar tiempo experimental c) Saber como argumentar y concluir los resultados obtenidos		
C. Competencias genéricas		
a) Capacidad de aplicar los conocimientos en la práctica. b) Capacidad creativa c) Habilidades para buscar, procesar y analizar información procedentes de diversas fuentes		



d) Capacidad de toma de decisiones

D. Temario

Temas		Subtemas
No	Nombre	
1	1. Proceso para el descubrimiento de los fármacos	1.1. Las dificultades en el proceso de la búsqueda de fármacos
2	2. Herramientas computacionales útiles para el diseño de nuevos farmacos	2.1. Modelado <i>in silico</i> 2.2. Diseño de fármacos basado en Estructura Reactividad 2.3. Modelado de acoplamiento molecular (Docking model)
3	3. Consideraciones a gran escala	3.1. Selección de los reactivos 3.2. Uso del disolvente 3.3. Operaciones unitarias 3.4. Presentación de un método simple, efectivo, eficiente y fácil de purificar 3.5. Diseño de ruta y optimización del proceso
4	4. Dirección en la optimización: Análisis de Hansch	4.1. Constante de Hammett: un parámetro electrónico 4.2. Constante de Hansch: Parámetro de lipofilidad 4.3. Parámetros esteéricos 4.4. Otros parámetros
5	5. Estrategias para la elucidación de estructuras modificaciones y rutas de degradación.	5.1. Consideraciones prácticas del empleo de LC-MS 5.2. Discusión del uso del NMR como elucidación estructural de impurezas traza.
	6. Selectividad Química	6.1. Planeando la síntesis orgánica: táctica, estrategia y control 6.2. Quimioselectividad



- | | | |
|--|--|---|
| | | <ul style="list-style-type: none">6.3. Regioselectividad6.4. Estereoselectividad6.5. Escogiendo una estrategia6.6. Enlace Carbono-Carbono6.7. Doble enlace Carbono-Carbono6.8. Estereoquímica6.9. Estrategias en los grupos funcionales |
|--|--|---|

6. Proyecto integrador (Para fortalecer las competencias de la asignatura con otras asignaturas)

- | |
|--|
| <ul style="list-style-type: none">1. Revisar las dificultades que han presentado una molécula de interés en la actualidad2. Ejemplificar mediante estrategias de modificación química la optimización de la molécula química para los fines deseados3. Generación de un producto terminal: Exposición Oral |
|--|

7. Evaluación por competencias (específicas y genéricas de Síntesis de Fármacos)

Requisito del Curso:

Cumplir con un 80% de asistencia

Criterios de evaluación:

Revisión y discusión de artículos, 40%

Evaluación escrita 30%

Proyecto terminal 30%

Calificación mínima aprobatoria 8.0

Bibliografía:

- | |
|---|
| <ul style="list-style-type: none">1. Li, M. Organic Chemistry of Drug Degradation. 2012. RSC Drug Discovery Series, Cambridge, UK. ISBN: 978-1-84973-421-92. Gibson, G.G.; Skett, P. Introduction to drug metabolism. 2001. Third edition. Nelson Thornes Publishers. Cheltenham, UK. ISBN: 0-7487-6011-3.3. Coyle, J.D. Introduction to organic photochemistry. 1986. John Wiley & Sons. UK. ISBN: 0-471-90975-0 |
|---|