

## Planeación del Curso Temas Selectos de Farmacoquímica

### INFORMACIÓN GENERAL

<b>Trimestre:</b>	26-I
<b>Clave:</b>	2141114
<b>Grupo:</b>	CM-01
<b>Profesor:</b>	Dr. Yoarhy Alejandro Amador Sánchez
<b>Cubículo:</b>	Laboratorio R-103.1
<b>Horario:</b>	Martes, <b>R122</b> de 14:00 - 17:00 hrs Jueves, <b>AT106</b> de 14:00 - 17:00 hrs

### MECANICA DEL CURSO

El curso se impartirá de manera presencial y contará con sesiones prácticas y seminarios como complemento. Además, se integrará un aula virtual en donde estarán disponibles todos los materiales necesarios, incluidos apuntes del curso, recursos adicionales y documentos relacionados con el diseño y síntesis orgánica de fármacos. La evaluación se realizará tomando en cuenta el desempeño en las sesiones prácticas, los exámenes y la impartición de seminarios de clase, con un enfoque en estrategias que garanticen un adecuado proceso de enseñanza-aprendizaje.

### INFORMACION SOBRE EL PROGRAMA DEL CURSO

#### OBJETIVOS DEL CURSO

##### **Objetivo General**

Que al final de la UEA el alumno sea capaz de:

Profundizar en el conocimiento de algunos temas de actualidad en el campo de la Farmacoquímica.

##### **Objetivos Específicos**

Que al final de la UEA el alumno sea capaz de:

Aplicar las herramientas experimentales y teóricas adquiridas en los cursos previos a un tema particular de Farmacoquímica.

### ASPECTOS PARA CONSIDERAR EN EL CURSO

- El alumno utilizará equipo de cómputo además de preparar seminarios relacionados con el diseño de fármacos.

### EVALUACIÓN DEL CURSO

El curso será evaluado de acuerdo con la siguiente ponderación:

Prácticas computacionales 30%

Seminarios 20%

Exámenes 50% (2 exámenes 25% cada uno)

**1er examen, 19 de febrero de 2026**

**2do examen, 26 de marzo de 2026**

### CONTENIDO SINTÉTICO DEL CURSO

#### 1. Diseño racional de fármacos

- Principios contemporáneos del diseño racional: desde el blanco biológico hasta el candidato a fármaco.
- Estrategias basadas en el ligante (ligand-based) y en estructura (structure-based): limitación y alcances.
- Evaluación de propiedades farmacocinéticas y ADME mediante plataformas *in silico*.
- Cálculo de parámetros termodinámicos de unión y energía libre de ligación.

#### 2. Caracterización estructural y termodinámica de complejos fármaco–diana.

- Parámetros termodinámicos de unión:  $\Delta G$ ,  $\Delta H$ ,  $\Delta S$ , y su interpretación.
- Modelos teóricos de interacción molecular y dinámica conformacional.
- Introducción a dinámica molecular: fundamentos, campos de fuerza e interpretación de trayectorias.

#### 3. Dinámica molecular en farmacoquímica:

- Conceptos de energía potencial, fuerzas y campos de fuerza
- Preparación de sistemas proteína–ligando: parametrización y solvatación.
- Parámetros de análisis: RMSD, RMSF, energía potencial, radio de giro, H-bonds.

- 
- Cálculo de energía libre de unión.
  - Aplicaciones de la dinámica molecular para validar resultados de docking y predecir estabilidad biológica.
- 4. Síntesis de moléculas heterocíclicas de importancia farmacéutica.**
- Síntesis de heterociclos vía reacciones de acoplamiento, radicales libres y otras metodologías sintéticas de actualidad.
  - Estrategias de síntesis heterocíclica modernas: formación de anillos por métodos clásicos vía reacciones de multicomponentes y mediante el uso de otros procesos modulares.
  - Reacciones de construcción de estructuras poliheterocíclicas con potencial bioactivo.
  - Aplicaciones de catálisis organometálica, fotoquímica y electroquímica para la síntesis de compuestos heterocíclicos.
  - Heterociclos relevantes en fármacos: piridinas, pirroles, indoles, quinolinas, pirimidinas, triazoles, etc. Un enfoque farmacológico.
  - Introducción a herramientas de planeación sintética asistida por métodos computacionales.
- 5. Síntesis de análogos de productos farmacéuticos por metodologías no convencionales**
- Rutas sintéticas alternativas: Síntesis multicomponente (Ugi, Passerini, Biginelli).
  - Uso de catálisis bajo luz visible para la construcción de moléculas farmacológicamente activas.
  - Reacciones asistidas por microondas, mecanoquímica y ultrasonido.
  - Enfoques de química verde en síntesis de productos análogos bioactivos.
  - Estrategias de diversificación estructural rápida para explorar relaciones SAR (relación estructura-actividad).
  - Análisis de la viabilidad sintética de análogos derivados del modelado molecular.
- 6. Discusión de artículos con ejemplos de síntesis totales actuales**
- Análisis crítico de estrategias sintéticas en síntesis total de productos naturales bioactivos.
  - Correlación entre la planeación retrosintética y la optimización de la ruta.
-



- Revisión de casos emblemáticos recientes (*Nature Chem.*, *Org. Chem.*, *J. Med. Chem.*)
- Enfoques de integración entre química orgánica sintética y farmacología.

---

## BIBLIOGRAFIA

1. Patrick, G. L. *An Introduction to Medicinal Chemistry*, 7th ed., Oxford University Press, 2024.
2. Silverman, R. B.; Holladay, M. W. *The Organic Chemistry of Drug Design and Drug Action*, 4th ed., Academic Press, 2023.
3. Artículos de investigación del *J. Med. Chem.*, *Eur. J. Med. Chem.*, *Org. Lett.*, *Nat. Chem.*, con cinco años de antigüedad (2020–2025).

## CALIFICACION FINAL

< 6.0	=	NA
6.0 a 7.4	=	S
7.5 a 8.4	=	B
8.5 a 10.0	=	MB

ATENTAMENTE

Dr. Yoarhy A. Amador Sánchez  
Departamento de Química