



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES CUAUTITLÁN
PLAN DE ESTUDIOS DE LA LICENCIATURA
EN QUÍMICA INDUSTRIAL**



**UNAM
CUAUTITLÁN**

PROGRAMA DE LA ASIGNATURA DE:
Diseño de Moléculas Asistido por Computadora

IDENTIFICACIÓN DE LA ASIGNATURA	
MODALIDAD:	Curso
TIPO DE ASIGNATURA:	Teórico – Práctica
SEMESTRE EN QUE SE IMPARTE:	Séptimo - Octavo
CARÁCTER DE LA ASIGNATURA:	Optativa
NÚMERO DE CRÉDITOS:	8

HORAS A LA SEMANA:	6	TEÓRICAS:	2	PRÁCTICAS:	4	SEMANAS DE CLASES:	16	TOTAL DE HORAS:	96
---------------------------	---	------------------	---	-------------------	---	---------------------------	----	------------------------	----

SERIACIÓN:	Si ()	No (X)	Obligatoria ()	Indicativa ()
ASIGNATURA ANTECEDENTE:	Ninguna			
ASIGNATURA SUBSECUENTE:	Ninguna			

OBJETIVOS GENERALES:
Al finalizar el curso el alumno:
a) Conocerá las técnicas de diseño molecular de materiales asistido por computadora.
b) Revisará los métodos computacionales utilizados para calcular descriptores y analizará con ayuda de la computadora, la información producida por dichos métodos.
c) Conocerá las principales bases de datos de donde se puede recuperar información útil para el diseño de materiales.

ÍNDICE TEMÁTICO			
UNIDAD	TEMAS	HORAS TEÓRICAS	HORAS PRÁCTICAS
1	Diseño Molecular Asistido por Computadoras	3	6
2	Métodos de Cálculo	5	10
3	Relaciones Estructura Actividad (SAR)	5	10
4	Relaciones Cuantitativas Estructura Actividad (QSAR)	5	10
5	Descriptores Moleculares	4	8
6	Relaciones Cuantitativas Estructura Propiedad (QSRP)	5	10
7	Bases de Datos	5	10
TOTAL DE HORAS TEÓRICAS		32	0
TOTAL DE HORAS PRÁCTICAS		0	64
TOTAL DE HORAS		96	

CONTENIDO TEMÁTICO

1. Diseño Molecular Asistido por Computadoras

- 1.1. Introducción.
- 1.2. Aspectos experimentales y modelos computacionales de las moléculas.
- 1.3. Relación entre modelos moleculares y el comportamiento de gases y fases condensadas.

2. Métodos de Cálculo

- 2.1 Mecánica molecular.
- 2.2 Campos de fuerza.
- 2.3 Métodos semiempíricos.
- 2.4 Aproximaciones involucradas.
- 2.5 Métodos *ab initio*.
- 2.6 Métodos de Teoría de Funcionales de la Densidad.
- 2.7 Conceptos básicos de dinámica molecular *ab initio*.
- 2.8 Conceptos básicos de simulaciones Montecarlo.

3. Relaciones Estructura Actividad (SAR)

- 3.1 Modelado molecular el desarrollo de nuevos materiales.
- 3.2 Métodos de relación estructura actividad (SAR).
 - 3.2.1 Generación y optimización de la estructura molecular.
 - 3.2.2 Análisis de estructuras análogas.
 - 3.2.3 Predicción de propiedades y actividad.
- 3.3 Análisis de estructuras análogas.
 - 3.3.1 Análisis conformacional.
- 3.4 Determinación de propiedades moleculares.

4. Relaciones Cuantitativas Estructura Actividad (QSAR)

- 4.1 Métodos de relación estructura actividad cuantitativa (QSAR).
- 4.2 QSAR tradicional.
- 4.3 QSAR tridimensional (COMFA y COMSIA).
- 4.4 Validación del modelo matemático.
- 4.5 Aplicaciones QSAR en el desarrollo de nuevas moléculas.

5. Descriptores Moleculares

- 5.1 Descriptores moleculares 1D, 2D y 3D.
- 5.2 Índices basados en propiedades químico, físicas.
- 5.3 Índices mecano cuánticos.
- 5.4 Índices topológicos y topográficos.

6. Relaciones Cuantitativas Estructura Propiedad (QSRP)

- 6.1 Predicción de punto de fusión.
- 6.2 Solubilidad.
- 6.3 Punto de ebullición.
- 6.4 pKa, constante de reparto.

7. Bases de Datos

- 7. Introducción a bases de datos públicas PubChem.
- 7.1 Bases de datos en la literatura: PubMed, ChemBank DrugBank.
- 7.2 Recursos de internet.
- 7.3 Búsqueda y recuperación de datos moleculares de propiedades fisicoquímicas, biológicas y toxicológicas para QSAR, QSPR.
- 7.5.- Uso de QSAR-Toolbook para la predicción de toxicidad en base a la OECD.

BIBLIOGRAFÍA

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

- Leach, A.R. (2001). *Molecular Modelling: Principles and applications* (2a. ed.). England: Prentice Hall.
- *Chemoinformatics* (2003). Gasteiger, J. y Thomas, E. (Eds.). Wiley-VCH.
- *Handbook of Chemoinformatics* (2003). Gasteiger, J. Weinheim: Wiley-VCH.
- Leach. (2003). *An introduction to Chemoinformatics*. Dordrecht: Springer.
- *Textbook of drug design and discovery* (2004). Larsen, et al. (Ed). (3a. ed.). London y New York: Taylor y Francis.

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

- Todeschini, R. and Consonni, V. (2009). *Molecular Descriptors for chemoinformatics*. Weinheim: Wiley-VCH.
- Livingstone, D.J. (2003). Theoretical Property Predictions, *Curr. Top. Med. Chem*, 3, 1171-92.

SITIOS WEB RECOMENDADOS

- <http://www.dgbiblio.unam.mx> (librunam, tesiunam, bases de datos digitales)
- NIST (National Institute of Standards and Technology Chemical Science and Technology Laboratory) <http://www.cstlnist.gov/>
- IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry) <http://www.iupac.org>
- IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry) <http://www.iupac.org>

SUGERENCIAS DIDÁCTICAS RECOMENDADAS PARA IMPARTIR LA ASIGNATURA

SUGERENCIAS DIDÁCTICAS	UTILIZACIÓN EN EL CURSO
Exposición oral	✓
Exposición audiovisual	✓
Actividades prácticas dentro de clase (experimentos de cátedra)	✓
Ejercicios fuera del aula	✓
Seminarios	✓
Lecturas obligatorias	✓
Trabajo de investigación	✓
Prácticas de taller: este taller se deberá realizar utilizando software especializado en la sala de cómputo	✓
Otras	TICs

MECANISMOS DE EVALUACIÓN

ELEMENTOS UTILIZADOS PARA EVALUAR EL PROCESO ENSEÑANZA-APRENDIZAJE	UTILIZACIÓN EN EL CURSO
Exámenes parciales	✓
Examen final	✓
Trabajos y tareas fuera del aula	✓
Exposición de seminarios por los alumnos	
Participación en clase	✓
Asistencia	✓

PERFIL PROFESIOGRÁFICO REQUERIDO PARA IMPARTIR LA ASIGNATURA			
LICENCIATURA	POSGRADO	ÁREA INDISPENSABLE	ÁREA DESEABLE
Química, Química Industrial	Ciencias Químicas	Fisicoquímica, Química Analítica, Q. Orgánica	Química teórica Química Computacional
Con experiencia docente			