

Programa Cursos Pre-congreso
XVI Reunión de la Academia Mexicana de Química Orgánica
23 al 25 de marzo de 2020
Universidad Autónoma de Nayarit. Tepic, Nayarit



CURSO	IMPARTIDO POR:	OBJETIVO GENERAL	OBJETIVO ESPECÍFICO	TEMAS Y SUBTEMAS
“Espectrometría de Masas”	M en C. Lizbeth Triana Dr. Roberto Martínez.	La identificación de compuestos orgánicos mediante la interpretación de su espectro de masas.	Conocer: a) Los componentes básicos de un espectrómetro de masas. b) Los métodos de introducción de la muestra. c) Los métodos de ionización. d) Los métodos de separación de los iones. e) La obtención de espectros. f) Como interpretar espectros de masas por grupos funcionales. g) Aplicaciones.	<ul style="list-style-type: none"> ❖ Introducción. ❖ Cronología. ❖ Componentes básicos en un Espectrómetro. ❖ Sistema de vacío. ❖ Muestra. <ul style="list-style-type: none"> • Entrada de la muestra. ❖ Sistemas de ionización. <ul style="list-style-type: none"> • (EI, CI, NCI, FAB, ESI, APCI, MALDI, DART, entre otros). ❖ Analizadores de masas. <ul style="list-style-type: none"> • (Q,QqQ, Sector magnético y eléctrico, QIT, TOF, entre otros). ❖ Detectores. Análisis de mezclas. <ul style="list-style-type: none"> • (HPLC-MS, GC-MS). ❖ Obtención de espectros. ❖ Interpretación de espectros por grupos funcionales. ❖ Aplicaciones.
“Elucidación estructural por	Dr. Armando Ariza	Determinar la estructura de compuestos químicos mediante	Conocer: a) Los métodos más utilizados en RMN.	<ul style="list-style-type: none"> ❖ Requisitos necesarios para realizar la RMN.

<p>técnicas de Resonancia Magnética Nuclear”</p>	<p>Castolo.</p>	<p>métodos de resonancia magnética nuclear (RMN) en 1 y 2 dimensiones.</p>	<p>Seleccionar:</p> <p>a) Los métodos en 1D y 2D que permitan la asignación de los compuestos químicos</p> <hr/> <p>Determinar:</p> <p>a) La estructura tridimensional de los compuestos químicos utilizando métodos espectroscópicos</p>	<ul style="list-style-type: none"> ❖ Método de pulsos y transformada de Fourier. ❖ Métodos más comunes en 1D y 2D para la determinación de compuestos. ❖ Determinación de la estructura molecular por RMN. ❖ Identificación de compuestos químicos por métodos espectroscópicos.
<p>““Diseño racional de fármacos: aplicaciones prácticas del empleo de técnicas de modelado in silico y simulación de interacción farmacoreceptor”</p>	<p>Dr. Juan Gabriel Navarrete Vázquez</p> <p>Dr. Sergio Nemorio Hidalgo Figueroa</p>	<p>Relacionar la estructura química y propiedades fisicoquímicas de las moléculas con su actividad farmacológica, y diseñar racionalmente nuevos agentes que puedan ser usados en la terapéutica experimental de enfermedades, usando técnicas in silico como docking molecular y diseño asistido por computadora</p>	<ul style="list-style-type: none"> ❖ Introducción a la química farmacéutica <ul style="list-style-type: none"> • Definiciones y fases de la acción de fármacos. • Compuestos bioactivos: Hits y Líderes. • Fragmentos estructurales de una molécula bioactiva: Farmacóforo, auxóforo, toxicóforo, metabóforo. ❖ Farmacodinamia en el diseño de moléculas bioactivas <ul style="list-style-type: none"> • Sitios diana de moléculas bioactivas • Mecanismo de acción molecular de fármacos. ❖ Farmacocinética (ADME) en el diseño de sustancias bioactivas <ul style="list-style-type: none"> • Influencia de las propiedades fisicoquímicas en los procesos ADME: Coeficiente de partición (log P), Tamaño molecular, grado de ionización, factores estereoelectrónicos. ❖ Biotransformación de Xenobioticos <ul style="list-style-type: none"> • Reacciones de Fase I: Oxidación, reducción e hidrólisis. 	

			<ul style="list-style-type: none">• Reacciones de Fase II : conjugación con biomoléculas solubles en agua.❖ Modificación molecular en el diseño de sustancias bioactivas• Descubrimiento de Hits y líderes. Desarrollo de Fármacos.• Procesos generales: Disgregación molecular y Conjunción molecular (Adición, Hibridización y conjunción)• Procesos especiales: Aumento o disminución de las dimensiones y la flexibilidad de la molécula.• Alteraciones de las propiedades fisicoquímicas por introducción de nuevos grupos o sustitución de nuevas partes (Bioisosterismo, homologación y vinilología).❖ Optimización farmacocinética (ADME).• Reglas predictivas de perfiles adecuados según la estructura molecular (Lipinski, Veber, otras)• Estrategias de Modificación estructural para mejorar la solubilidad y la permeabilidad• Estrategias de Modificación estructural para mejorar la penetración cerebral• Estrategias de Modificación estructural para mejorar la estabilidad metabólica (Fase I y II)• Estrategias de Modificación estructural para reducir la inhibición de CYP450• Estrategias de Modificación estructural para reducir el bloqueo de canales hERG❖ Optimización Farmacodinámica de moléculas bioactivas
--	--	--	--

			<ul style="list-style-type: none">• Criterios de modificación molecular racional para el diseño de sustancias bioactivas.• Scaffold Hopping (Armazón biosinonímico) y optimización selectiva de actividades colaterales (SOSA approach)• Visualización tridimensional (3D) de blancos moleculares y complejos ligando-sitio activo. <p>❖ Introducción al software (Autodock Vina y Chimera)</p> <ul style="list-style-type: none">• Configuraciones generales y terminología• Protein Data Bank• Visualización de estructuras de proteínas con Pymol (Uso de software auxiliar (Pymol, Chimera))• Introducción al acoplamiento molecular• Obtención y preparación del receptor (proteína) y ligando <p>Nota: Cada software contará con una guía de ejercicios para aprender el uso del software.</p> <p>❖ Practica: Docking semi-flexible con Autodock Vina. (interacción fármaco receptor)</p>
--	--	--	--