



Vamos a comenzar en breve, a las 1 CST / 2 EST



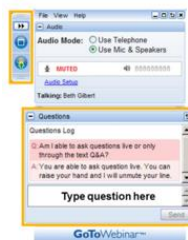
El Sexto Webinar en Español auspiciado por el ACS y la SQM

<http://bit.ly/IndustriaFarma>

1



¿Tiene alguna pregunta?



“¿Por qué he sido “silenciado”?”

No se preocupe. Todo el mundo ha sido silenciado, excepto los presentadores y la moderadora. Gracias, y disfruten de la presentación.

Escriba y someta sus preguntas durante la presentación

2



## ¿Está en un grupo grande hoy?



Díganos de dónde son ustedes y cuántas personas están en su grupo!

3



## La Diversidad de la Audiencia



Hoy tenemos representantes de **17 países**

4



## ¡C&EN en Español!

C&EN pone a su disposición traducciones al español de sus artículos más populares.

<p>April 11, 2016 <b>Al fin, científicos identifican la estructura de la proteína objetivo de los antidepresivos</b> La estructura del transportador de la serotonina podría ser la clave en el descubrimiento de nuevas terapias contra la depresión.</p> <p><b>At last, scientists solve structure of protein that antidepressants target</b> Serotonin transporter structure could provide map for discovering new therapeutics for depression.</p>	
<p>April 4, 2016 <b>Una mini-fábrica de medicamentos produce dosis continuamente</b> Se trata de un sistema modular que fabrica de forma eficiente cuatro medicamentos.</p> <p><b>Mini drug factory continuously produces doses</b> Modular system efficiently makes four approved drugs.</p>	<p>Diazepam</p>
<p>March 28, 2016 <b>Un parche de grafeno podría ayudar a los pacientes a controlar la diabetes</b> Un dispositivo portátil de doble función monitoriza el nivel de glucosa en el sudor y libera medicamentos a través de la piel.</p> <p><b>Graphene patch could help patients manage diabetes</b> Wearable, dual-function device monitors glucose in sweat and delivers drugs through skin.</p>	
<p>March 21, 2016 <b>El átomo de cesio se coordina a 16 átomos de flúor para formar un complejo que bate récords</b></p> <p><b>Cesium atom coordinates with 16 fluorine atoms in record-setting complex</b></p>	

Gracias a una colaboración con la organización española Divulgame.org, C&EN ahora es capaz de ofrecer traducciones al español de algunos de nuestros mejores contenidos.

Queremos hacer de la ciencia de vanguardia más accesible a la comunidad química de habla española, y esta es nuestra contribución. Le da a los nacidos en España, América Latina, o los EE.UU., pero cuyo primer idioma es el español la oportunidad de leer este contenido en su lengua materna. Esperamos que les guste y sea de su utilidad.



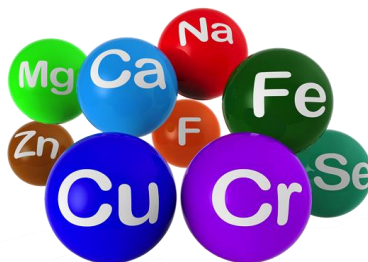
Dr. Bibiana Campos Seijo  
Editor-in-Chief of C&EN

<http://bit.ly/CENespanol>

5



¿Has descubierto el elemento que falta ?



[www.acs.org/2joinACS](http://www.acs.org/2joinACS)

Entérate de los beneficios de ser

6



## Beneficios de la afiliación al ACS



**Chemical & Engineering News (C&EN)**  
The preeminent weekly news source.



**NEW! Free Access to ACS Presentations on Demand®**  
ACS Member only access to over 1,000 presentation recordings from recent ACS meetings and select events.



**NEW! ACS Career Navigator**  
Your source for leadership development, professional education, career services, and much more.

[www.acs.org/2joinACS](http://www.acs.org/2joinACS)

7



## Sociedad Química de México



Sociedad Química de México, A.C.  
"La química nos une"

Desde sus comienzos de la Sociedad Química de México, se buscaba un emblema sencillo, no demostrar partidismo alguno y significar al gremio, debería representar un símbolo no sólo para los químicos, sino también para ingenieros, farmacéuticos, metalurgistas, en fin que englobe e identifique por igual a los científicos en todas sus áreas de la ciencia química.

[www.sqm.org.mx](http://www.sqm.org.mx)

8



Sugieran temas y expertos que les interesarían para los próximos webinars. [acswebinars@acs.org](mailto:acswebinars@acs.org)



### **“Aciertos, Errores y Secretos en el Diseño de Fármacos”**

27 de Julio, 2016 12 CDT / 1pm EDT

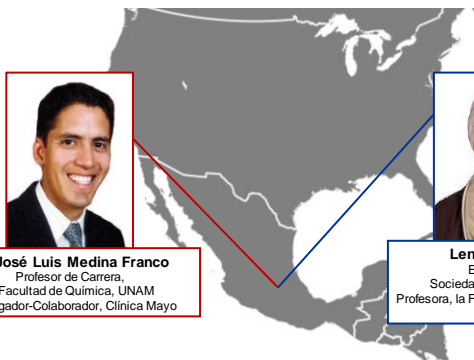
Dr. Gabriel Navarrete-Vázquez

<http://bit.ly/ACS-SQMwebinars>

9



### **“Diseño de Fármacos por Computadora: Mitos, Realidades y Algo Más”**



**Dr. José Luis Medina Franco**  
Profesor de Carrera,  
la Facultad de Química, UNAM  
Investigador-Colaborador, Clínica Mayo

**Lena Ruiz Azuara**  
Ex-Presidente,  
Sociedad Química de México  
Profesora, la Facultad de Química, UNAM

**Las imágenes de la presentación están disponibles para descargar ahora**

<http://bit.ly/FarmacosEspanol>

El Webinar de hoy esta auspiciado por la Sociedad Química de México y the American Chemical Society

10

## Diseño de Fármacos por Computadora: Mitos, Realidades y Algo Más ...

El descubrimiento de fármacos es un proceso complejo y costoso en el cual convergen diversas áreas del conocimiento. En años recientes métodos computacionales se han integrado a este esfuerzo multidisciplinario. En un proyecto determinado, la aplicación de estrategias de cómputo depende de la información disponible del sistema y de los objetivos específicos del estudio. A la fecha, los métodos computacionales han contribuido, entre otras aplicaciones, al análisis eficiente de datos, el filtrado colecciones de compuestos para seleccionar moléculas para evaluación experimental, la generación de hipótesis para ayudar a entender el mecanismo de acción de fármacos y el diseño de nuevas estructuras químicas. Además, los métodos de cómputo han tenido aportaciones significativas para desarrollar medicamentos que se encuentran en uso clínico. Sin embargo, quedan muchos retos que afrontar, mismos que estimulan la innovación y mejoramiento de métodos que se integren al esfuerzo multidisciplinario del desarrollo de fármacos.

### Semblanza José Luis Medina

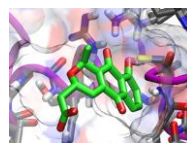


#### Posición actual:

- *Profesor de Carrera Titular*
- Departamento de Farmacia
- Laboratorio de Diseño de Fármacos Asistido por Computadora en la Facultad de Química (DIFACQUIM)
- Universidad Nacional Autónoma de México
- Correo electrónico: [medinajl@unam.mx](mailto:medinajl@unam.mx)
- Página del grupo de investigación (en español):  
<http://www.difacquim.com/>



## José Luis Medina



### Áreas de investigación:

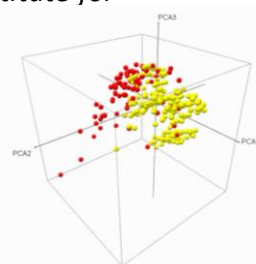
- Diseño de Fármacos Asistido por Computadora.
- Modelado molecular de compuestos con actividad biológica.
- Identificación de compuestos bioactivos con cribado virtual (*virtual screening*).
- Desarrollo y aplicación de nuevos métodos para cuantificar relaciones estructura actividad (QSAR; *activity landscape modeling*).
- Quimiogenómica computacional incluyendo reposicionamiento de fármacos y búsqueda sistemática de blancos terapéuticos.
- Análisis quimiinformático de bases de datos moleculares.



## José Luis Medina

### Educación y capacitación:

- 1993-1997 Licenciatura en Química, Facultad de Química, UNAM
- 1998-2000 Investigador Asociado, Procter & Gamble, Mexico
- 2000-2002 Maestría en Ciencias, UNAM
- 2002-2005 Doctorado en Ciencias, UNAM
- 2005-2007 Estancia Posdoctoral, *University of Arizona*
- 2007-2012 Investigador Titular, *Torrey Pines Institute for Molecular Studies*, Florida
- 2013-2014 *Resarch Scientist*, Departamento de Investigación, *Mayo Clinic*, Arizona



LinkedIn: <https://mx.linkedin.com/in/jose-medina-franco-0bf>

## José Luis Medina

### Reconocimientos y premios:

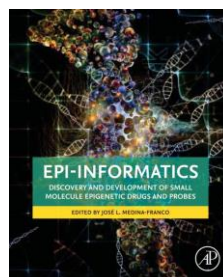
- Investigador Nacional del Sistema reconocido por el Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología de México (CONACYT-MEX), Nivel II.
- Autor de los 10 más citados en la UNAM en 2014, área de Química.
- Medalla Alfonso Caso. Estudios de Doctorado en Ciencias y Maestría en Ciencias; Medalla Gabino Barreda, Licenciatura, UNAM.
- Acciones de Reconocimiento. Procter & Gamble, Global Home Care, Bélgica, 1999.



## José Luis Medina

### Publicaciones:

- 128 artículos en revistas indizadas (índice  $h = 28$ )
- 20 capítulos en libros
- Más de 1500 citas a publicaciones
- 1 patente internacional
- Co-editor del libro *Foodinformatics*, 2014 (Springer)
- Editor y autor de capítulos en el libro *Epi-Informatics*, 2016 (Elsevier)



<http://www.difacquim.com/investigación-y-publicaciones/>





## José Luis Medina

### Otros:

- Colaborador de Investigación, Mayo Clinic, Scottsdale, Arizona.
- Editor Asociado de *RSC Advances* (Royal Society of Chemistry).
- Miembro del Comité Editorial de *Journal of the Mexican Chemical Society y Molecular Diversity* (Spinger).
- Árbitro de +30 revistas especializadas nacionales e internacionales.
- Miembro de la ACS, SQM y diversas organizaciones científicas y profesionales.



## DISEÑO DE FÁRMACOS POR COMPUTADORA

### Mitos, Realidades y Algo Más ...

Dr. José Luis Medina Franco  
 DIFACQUIM  
 Departamento de Farmacia  
 Facultad de Química, UNAM  
 medinajl@unam.mx



SQM – ACS Webinar  
 27 de Abril, 2016





- **Diseño y desarrollo de fármacos**
  - Integración de técnicas computacionales
  - Lo que NO hacen las computadoras ← Mitos
- **Métodos computacionales comunes** ← Realidades
  - Ejemplos de aplicaciones
- **Ejemplos de casos exitosos**
- **Resumen: Para llevar a casa**
- **Perspectivas** ← Algo más ...



## Encuesta Para La Audiencia

RESPONDERA LA PREGUNTA HACIENDO  
CLICK EN BREVE EN LA PANTALLA AZUL

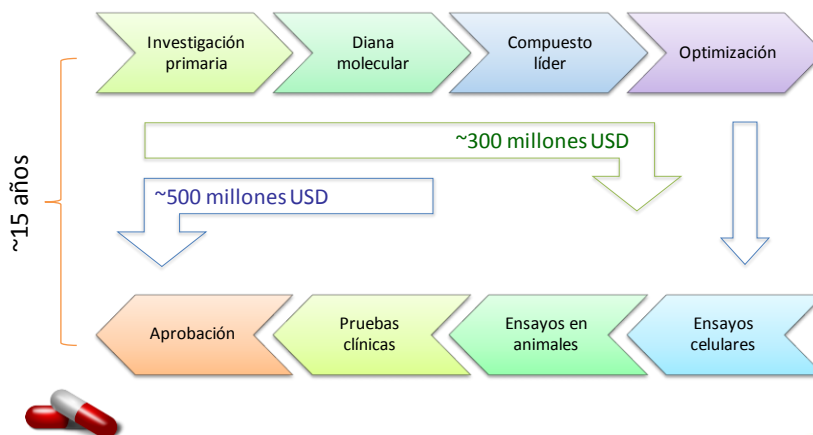


**En promedio, ¿en cuántos años se desarrolla un fármaco?**

- 1-5
- 5-10
- 10-15
- Más de 15

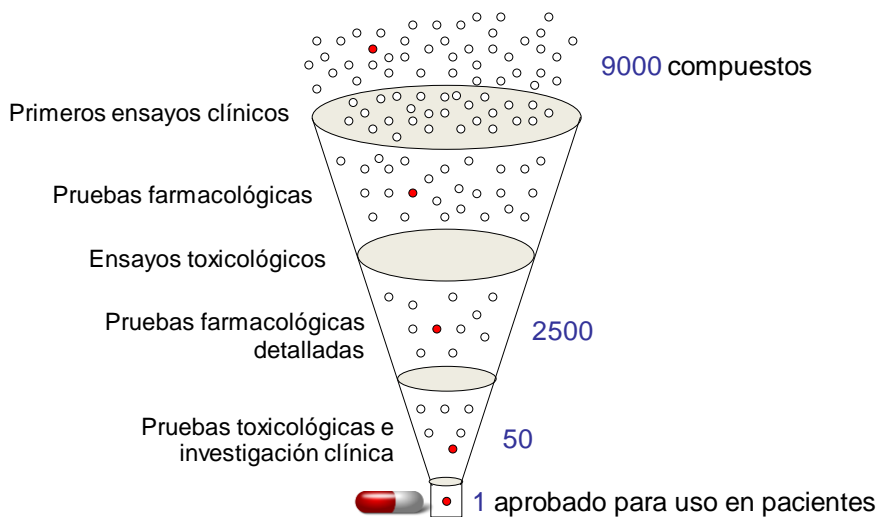
## Etapas en el desarrollo de fármacos

Costo y tiempo aproximado



:1

## Probabilidad de éxito en estudios clínicos



Andrejus Korolkovas. Essentials of Medicinal Chemistry. John Wiley & Sons.1988



:2

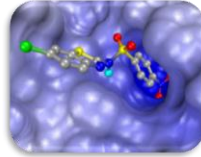
## Modelo de la “llave y cerradura”

Diseño enfocado a una diana molecular



Emil Fischer  
(1852-1919)

“La especificidad de una **enzima** (la **cerradura**) por su **substrato** (la **llave**) proviene de la complementariedad geométrica de las formas”



Biología molecular,  
estructura de proteínas



Diseño de fármacos enfocado a una  
diana molecular



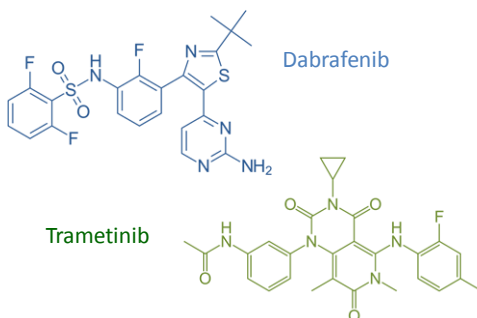
E. Fischer, Ber Dtsch Chem Ges (1894) 27:2985



:3

## Polifarmacología

los fármacos no son selectivos



Ambos anticancerígenos inhiben a  
varias protein cinasas



2013 FDA drug approvals

Mullard A.  
Nature Rev Drug Discovery (2014) 13:85

**Polifarmacología:** el efecto clínico de diversos fármacos se debe a  
la interacción con múltiples dianas terapéuticas

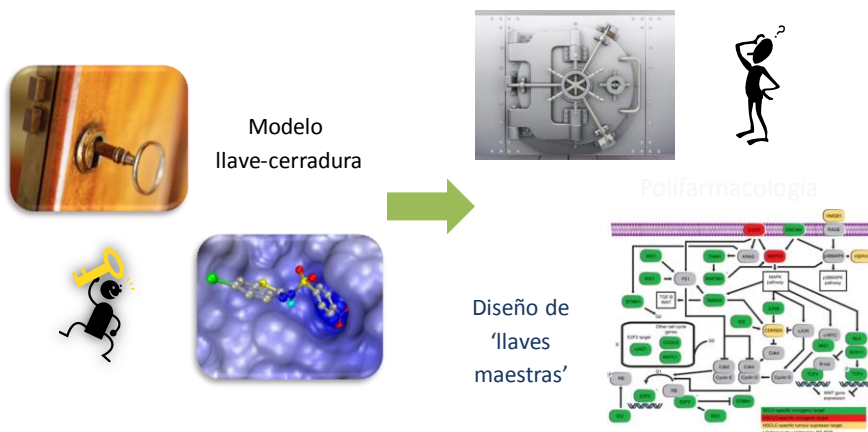


:4

## Cambio en estrategia de diseño de fármacos

Dirigido a una diana terapéutica

Dirigido a múltiples dianas



Medina-Franco JL et al. *Drug Discovery Today* (2013) 18:495



:5

## Estrategias para identificar compuestos líder



- Optimización de fármacos existentes
- Ensayo biológico sistemático
- Uso de la información biológica disponible
- **Diseño y descubrimiento asistido por computadora**

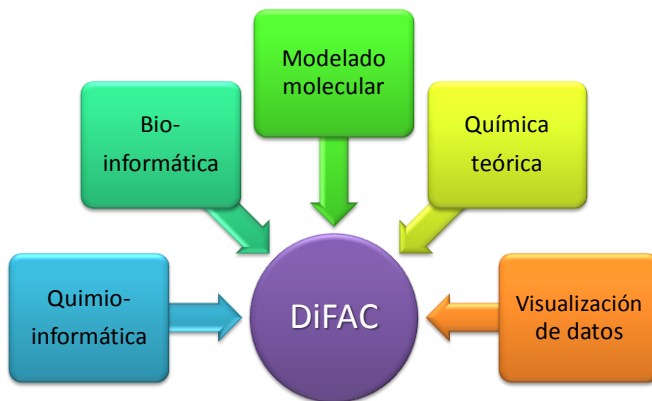


Wermuth CG. *The Practice of Medicinal Chemistry*. Wermuth CG Ed. Academic Press, 2003

26

## Diseño de Fármacos Asistido por Computadora

DiFAC es un conjunto de técnicas computacionales



Jorgensen WL. The many roles of computation in drug discovery. *Science* (2004) 303:1813



17

## Diseño de Fármacos Asistido por Computadora (DiFAC): Objetivos

### Identificar nuevos compuestos

Descubrir o diseñar nuevas estructuras con efecto biológico en una categoría terapéutica deseada

### Seleccionar candidatos

Evaluar la identidad del "líder ganador" (o eliminar rápidamente a "líderes perdedores")

### Optimizar líderes

Optimizar al compuesto líder para mejorar las propiedades deseadas y disminuir los efectos adversos



28

## Los mitos!

### Lo que no es DiFAC

- Las computadoras NO son fábricas de fármacos
- Los modelos computacionales NO hacen predicciones exactas de la actividad *in vivo*
- Un método cuantitativo no es necesariamente predictivo
- Los cálculos NO demuestran la actividad biológica
  - El *docking* NO demuestra que la molécula se une al receptor

¿Algún medicamento se ha diseñado directamente por computadoras?

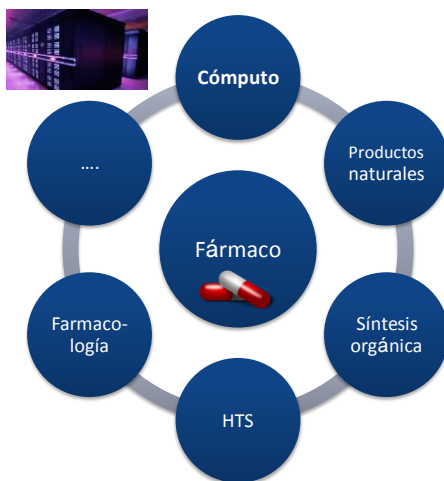


29

## La realidad

### Diseño asistido por computadora

Combinación con otros métodos



30

## Encuesta Para La Audiencia

RESPONDER A LA PREGUNTA HACIENDO  
CLICK EN BREVE EN LA PANTALLA AZUL



### ¿Qué método computacional se emplea en diseño de fármacos?

- Acoplamiento molecular automatizado
- Cribado virtual
- Cálculos ab initio
- Todos los anteriores

31

## Métodos computacionales comunes

- **Acoplamiento molecular automatizado** (*docking*)
    - Moléculas pequeñas, proteína-proteína
  - **Modelado del farmacóforo**
  - **Cribado virtual** (*virtual screening*)
  - **Reposicionamiento de fármacos asistido por computadora**
    - Similitud molecular
  - **Quimioinformática**
  - **Dinámica molecular**
  - **Relaciones estructura-actividad**
    - QSAR, modelos de 'panoramas de actividad', etc.
- La elección del método depende del problema

Tamaño y complejidad del sistema

Precisión



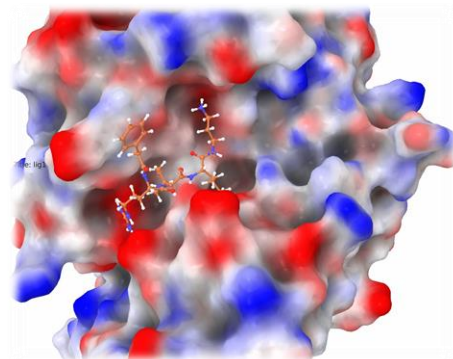
32



## Acomplamiento molecular automatizado

### Docking


- Predecir el modo de unión de una molécula con una diana molecular
- Objetivos:
  - Relaciones estructura-actividad
  - Optimización
  - Evaluación computacional de compuestos
- Rápido y de bajo costo
- Programas:
  - AutoDock, Dock,
  - Gold, Glide ... > 65 herramientas



33

## Modelo computacional de fármaco aprobado

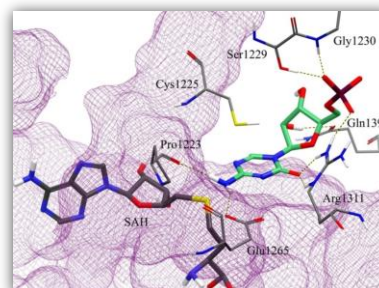
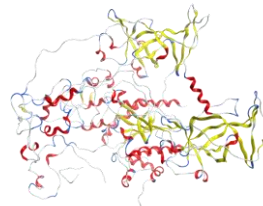
### DNA metiltransferasa (DNMT)



VIDAZA es el primer fármaco aprobado por la FDA para el tratamiento de síndromes mielodisplásicos (MDS)

NC1=NC=NC(=O)N1[C@@H]2O[C@H](COP(=O)([O-])[O-])[C@@H](O)[C@H]2O

VIDAZA®  
(Azacitidina)



Modelo de unión con DNMT



34

Yoo J, Kim JH, Robertson KD, Medina-Franco JL. *Adv Protein Chem Struct Biol* (2012) 87:219

## Modelo de ingrediente activo de té verde

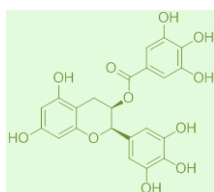
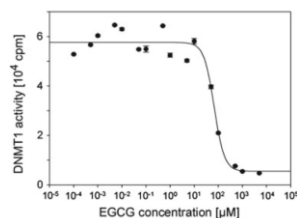
### DNA metiltransferasa (DNMT)



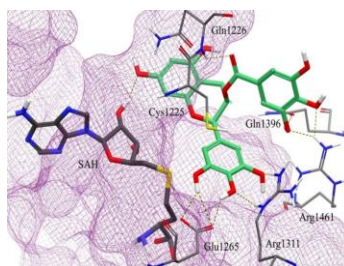
EGCG



EGCG inhibe a DNMT1



Modelo de unión con DNMT



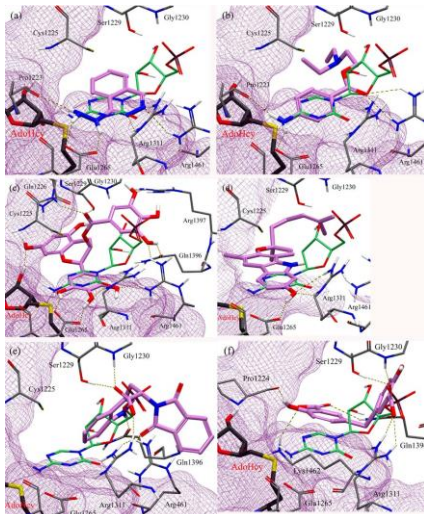
Medina-Franco JL, Méndez-Lucio O, Yoo J, Dueñas A. *Drug Discovery Today* (2015) 20:569



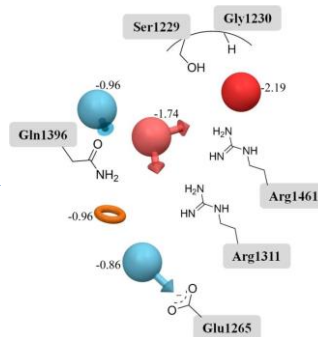
35

## Modelo del farmacóforo

Modelos de unión de 14 inhibidores



1. Mapeo de interacciones de *docking* en los átomos
2. Generar sitios farmacofóricos
3. Sumar las energías de los átomos correspondientes a los sitios farmacofóricos
4. *Ranking* de los sitios

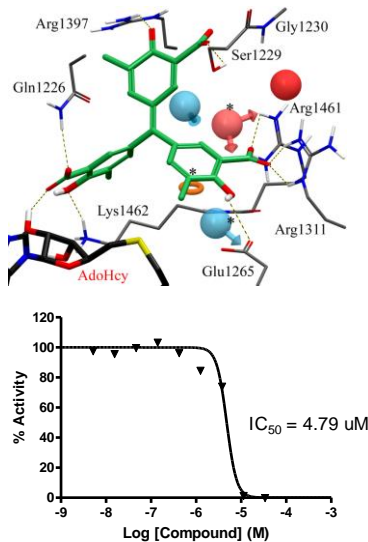


Yoo J, Medina-Franco JL. *Journal of Computer-Aided Molecular Design* (2011) 25:555

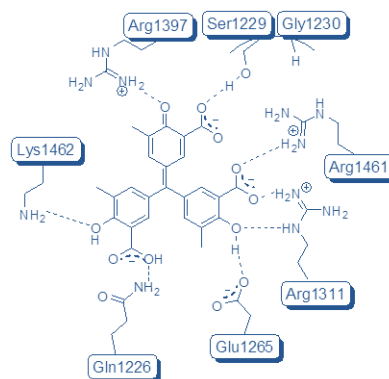


36

## Aplicación del modelo del farmacóforo



El ácido trimetil aurintricarboxílico es inhibidor de DNMT1



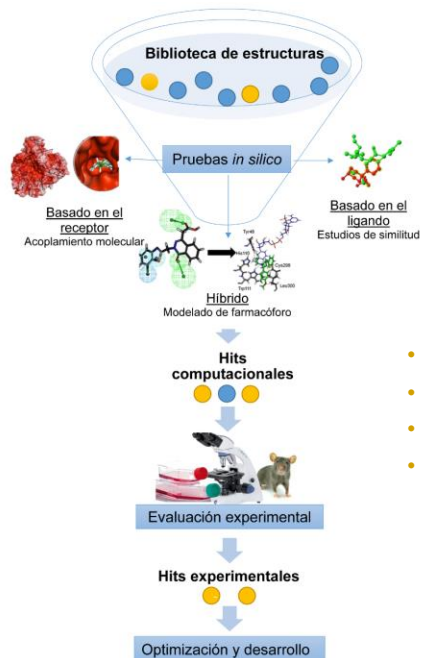
Yoo J, Medina-Franco JL. *Journal of Molecular Modeling* (2011) 18:1583



37

## Cribado virtual o ensayos *in-silico*

*Virtual screening*



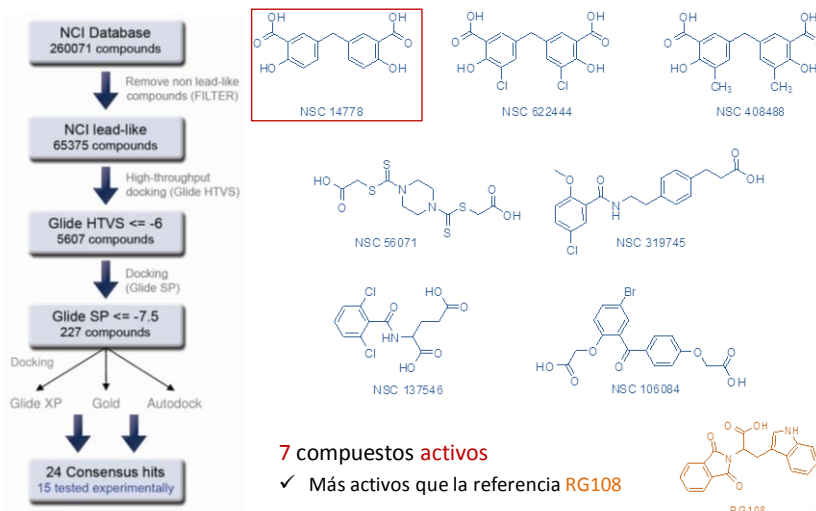
- Encontrar compuestos activos
- Reducir el número de ensayos biológicos
- Disminuir costos y tiempos
- Incrementar la *probabilidad* de encontrar moléculas activas



38

## Cribado virtual de bibliotecas moleculares

### Aplicación de *docking*: inhibidores de DNMT

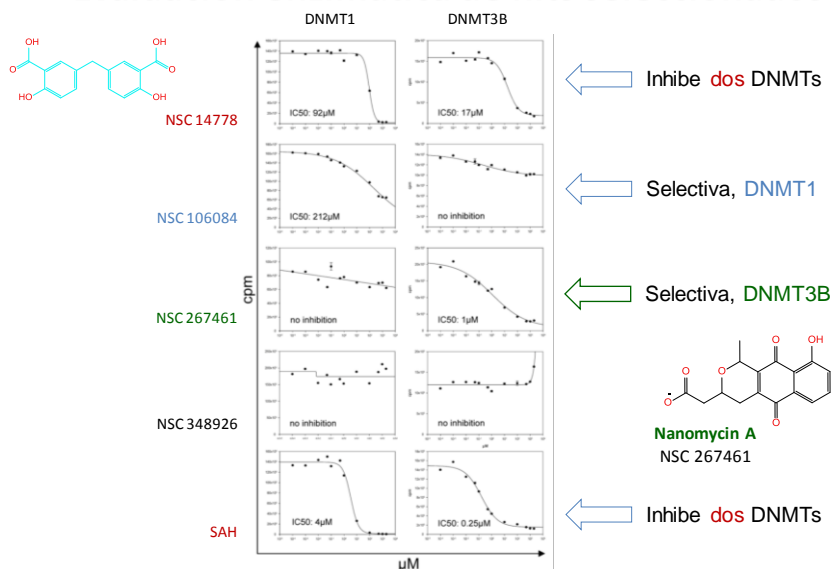


Kuck D, Singh N, Lyko F, Medina-Franco JL. *Bioorganic and Medicinal Chemistry* (2010) 18:822



39

## Evaluación enzimática de hits seleccionados



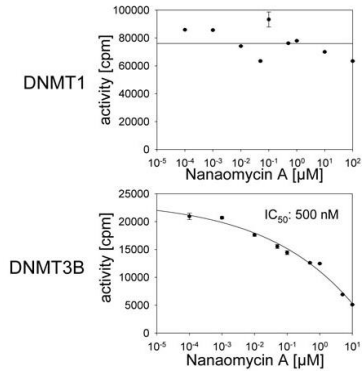
Kuck D, Singh N, Lyko F, Medina-Franco JL. *Bioorganic and Medicinal Chemistry* (2010) 18:822



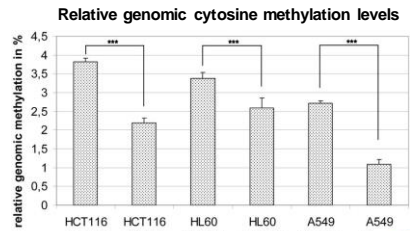
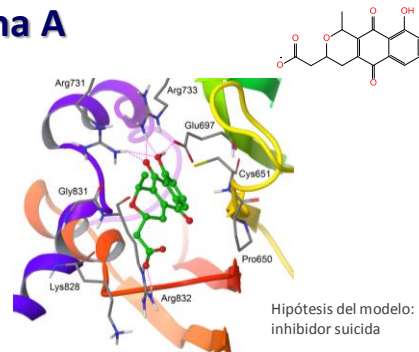
40

## Actividad de nanaomycina A

### Inhibidor selectivo de DNMT3B



En tres líneas celulares, nanaomycina A reduce niveles de metilación



Kuck D, Caulfield T, Lyko F, Medina-Franco JL. *Molecular Cancer Therapy* (2010) 9:3015



41

## Nanaomycina A: del laboratorio al mercado

**APEX BIO**  
An Apoptosis and Epigenetics Company

Products Services Tools Ordering Distributors Evaluation Samples About Us Contact Us

Home >> Signaling Pathways >> Chromatin/Epigenetics >> DNA Methyltransferase >> Nanaomycin A

**Nanaomycin A** DNMT3B inhibitor

Catalog No. A8191

Size	Price	Stock	Qty
5mg	\$350.00	In stock	0
25mg	\$1,000.00	In stock	0

Tel: +1-832-696-6203  
Email: sales@apexbt.com  
Worldwide Distributors

Quality Control

Quality Control & MSDS  
View current batch: [3] [v]

Purity = 99.39%

COA (Certificate Of Analysis)

HPLC

NMR (Nuclear Magnetic Resonance)

MSDS (Material Safety Data Sheet)

Chemical structure

Related Biological Data

Western blot analysis showing DNMT1, DNMT3B, W-DAX, and  $\beta$ -Actin levels in Control and Nanaomycin A treated cells. Treatment with Nanaomycin A does not significantly affect DNMT1 and DNMT3B level.

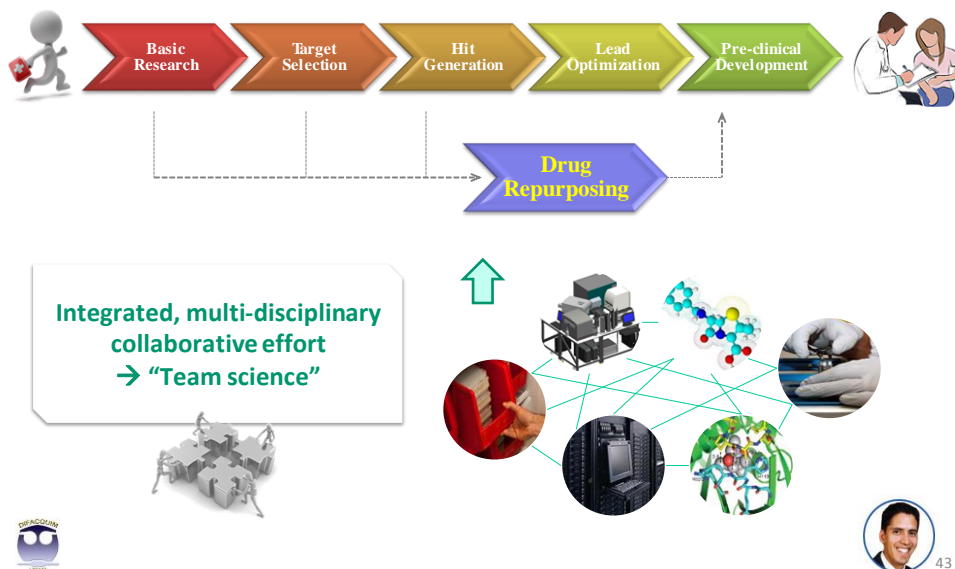
References:

1. Kuck D1, Caulfield T, Lyko F et al. Nanaomycin A selectively inhibits DNMT3B and reactivates silenced tumor suppressor genes in human cancer cells. *Mol Cancer Ther.* 2010 Nov;9(11):3015-23.
2. Kitaura K, Araki Y, Marumo H. The therapeutic effect of nanaomycin A against experimental *Trichophyton mentagrophytes* infection in guinea pigs. *Kitaura K, Araki Y, Marumo H.*



42

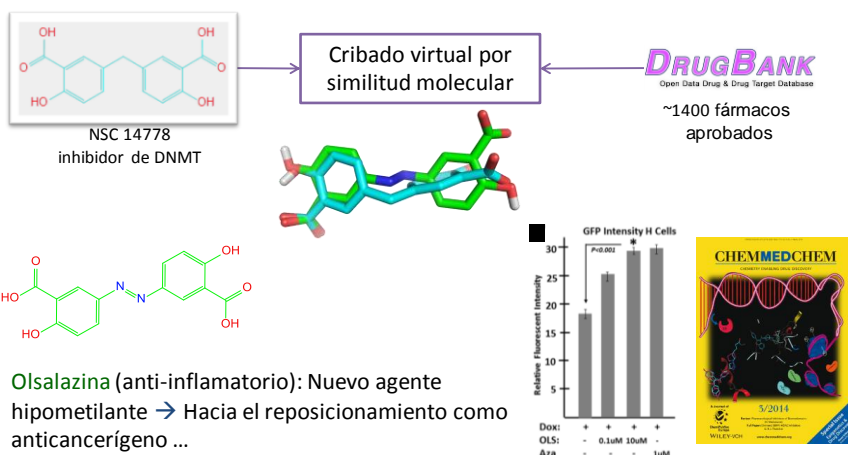
## Reposicionamiento de fármacos asistido por computadora



## Cribado virtual de fármacos aprobados

Aplicación de *similitud molecular*

Hipótesis: Moléculas similares tienen propiedades similares



Olsalazina (anti-inflamatorio): Nuevo agente hipometilante → Hacia el reposicionamiento como anticancerígeno ...



Mendez-Lucio O, Tran J, Medina-Franco JL, Meurice N, Muller M *ChemMedChem* (2014) 9:560



44



## Encuesta Para La Audiencia

RESPONDER A LA PREGUNTA HACIENDO  
CLICK EN BREVE EN LA PANTALLA AZUL



### ¿Qué fármaco se ha diseñado ÚNICAMENTE por computadoras?

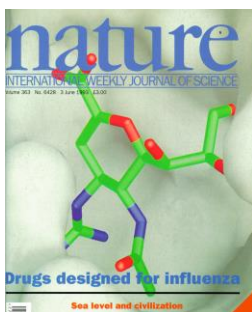
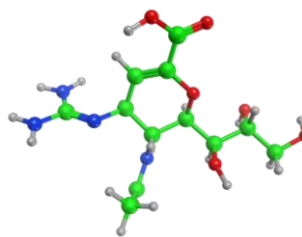
- Viagra
- Crixivan
- Relenza
- Ninguno

45

RELENZA® (zanamavir)

Antiviral (Influenza)

GlaxoSmithKline (1999)



### Rational design of potent sialidase-based inhibitors of influenza virus replication

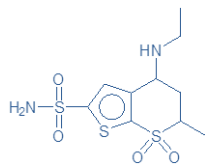
Mark von Itzstein\*, Wen-Yang Wu\*, Gaik B. Kok\*, Michael S. Pegg\*, Jeffrey C. Dyason\*, Betty Jin\*, Tho Van Phan\*, Mark L. Smythe\*, Hume F. White\*†, Stuart W. Oliver\*, Peter M. Colman‡, Joseph N. Varghese‡, D. Michael Ryan§, Jacqueline M. Woods§, Richard C. Bethell§, Vanessa J. Hotham§, Janet M. Cameron§ & Charles R. Penn§

\*Department of Pharmaceutical Chemistry, Victorian College of Pharmacy, Monash University, 381 Royal Parade, Parkville, Victoria 3052, Australia  
†CSIRO Division of Biomolecular Engineering, Parkville, Victoria 3052, Australia  
‡Glaxo Group Research Ltd, Greenford, Middlesex UB6 0HE, UK

Two potent inhibitors based on the crystal structure of influenza virus sialidase have been designed. These compounds are effective inhibitors not only of the enzyme, but also of the virus in cell culture and in animal models. The results provide an example of the power of rational, computer-assisted drug design, as well as indicating significant progress in the development of a new therapeutic or prophylactic treatment for influenza infection.



46



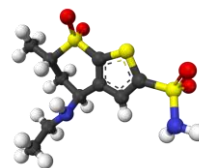
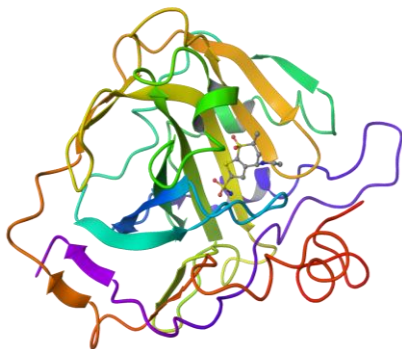
## TRUSOPT® (dorzolamida)

Glaucoma

Merck (1995)

Diseño basado en estructura

Cálculos *ab initio*



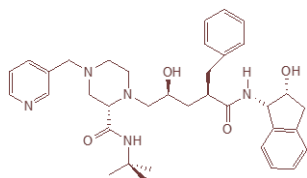
Anhidrasa carbónica



Greer J. et al. *Journal of Medicinal Chemistry* (1989) 32:2510



47



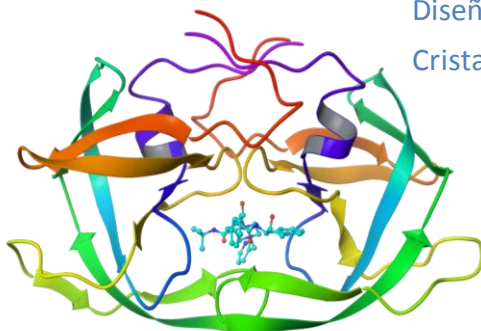
## CRIXIVAN® (indinavir)

Antiviral (SIDA)

Merck (1996)

Diseño basado en estructura

Cristalografía de rayos X



CRIXIVAN®  
(indinavir sulfate, MSD)

Proteasa de HIV



Holloway, M. K. et al. *Journal of Medicinal Chemistry* (1995) 38:305



48



## PARA LLEVAR A CASA ....

### Cómputo en descubrimiento de fármacos

- **Parte de un esfuerzo multidisciplinario**
- **La elección del método(s) depende de:**
  - Información (experimental) disponible
  - Objetivos del proyecto
- **Contribuciones clave:**
  - Filtrado (rápido) y selección de compuestos
  - Análisis eficiente de (miles/millones) de datos
  - Generar hipótesis para entender actividad a nivel molecular
- **Refinamiento constante de métodos existentes**
- **Desarrollo de nuevos métodos**



## PERSPECTIVAS: RETOS QUE AFRONTAR

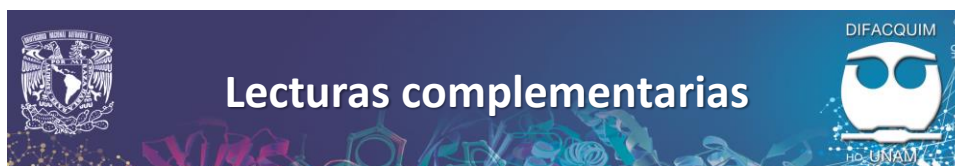
- Incrementar la eficiencia de cribado virtual
- **Quimiogenómica computacional**
  - Entender y predecir polifarmacología
  - Diseño dirigido a múltiples dianas; diseño de 'llaves maestras'
- Aumentar número y calidad de recursos en línea
- Incrementar eficiencia de fases clínicas
  - Predecir toxicidad, metabolismo
- Vinculación con otros grupos y áreas de la química



## Ejemplos de vinculación



51



## Aplicaciones exitosas del diseño de fármaco utilizando métodos computacionales

José Luis Medina Franco

Ciencia (Mexico) 2007

Educación Química (2015) 26, 180-186



educación  
**Química**  
www.educacionquimica.info

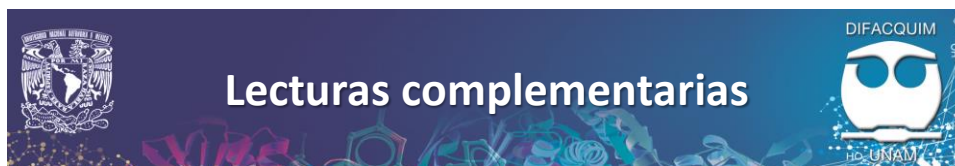


PROFESORES AL DÍA

Avances en el diseño de fármacos asistido por computadora

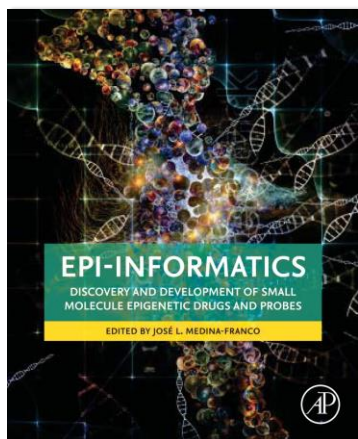
José L. Medina-Franco<sup>a,\*</sup>, Eli Fernández-de Gortari<sup>a</sup> y J. Jesús Naveja<sup>a,b</sup><sup>a</sup> Facultad de Química, Departamento de Farmacia, Universidad Nacional Autónoma de México, México D.F., México<sup>b</sup> Facultad de Medicina, PECEM, Universidad Nacional Autónoma de México, México D.F., México

52



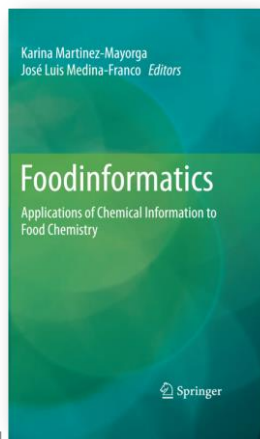
## Lecturas complementarias

Integración de informática con ...



2016

... epigenética



2014

... química de alimentos



53



## ¡GRACIAS!

José L. Medina Franco

[medinajl@unam.mx](mailto:medinajl@unam.mx)

Diseño de Fármacos Asistido por  
Computadora en la Facultad de Química  
DIFACQUIM

[www.difacquim.com](http://www.difacquim.com)

Gracias a la DGAPA (UNAM) por el apoyo al  
PROGRAMA DE APOYO A PROYECTOS PARA LA  
INNOVACIÓN Y MEJORAMIENTO DE LA ENSEÑANZA  
(PAPIME), proyecto PE200116



Grupo Actual

Dr. Oscar Méndez Lucio

Postdoctorado

Eli Fernández de Gortari

Estudiante de Doctorado

Fernando Prieto Martínez

Estudiante de Maestría

Andrea Peña Castillo

Mariana González Medina

Jesús Naveja Romero

Hugo Vite Caritino

Estudiantes de licenciatura

Fernanda Saldívar

Servicio Social



54



Sugieran temas y expertos que les interesarían para los próximos webinars. [acswebinars@acs.org](mailto:acswebinars@acs.org)



## “Aciertos, Errores y Secretos en el Diseño de Fármacos”

27 de Julio, 2016 12 CDT / 1pm EDT

Dr. Gabriel Navarrete-Vázquez

<http://bit.ly/ACS-SQMwebinars>

55



## ¡C&EN en Español!

C&EN pone a su disposición traducciones al español de sus artículos más populares.

<p>April 11, 2016 <b>Al fin, científicos identifican la estructura de la proteína objetivo de los antidepresivos</b> La estructura del transportador de la serotonina podría ser la clave en el descubrimiento de nuevas terapias contra la depresión.</p> <p><b>At last, scientists solve structure of protein that antidepressants target</b> Serotonin transporter structure could provide map for discovering new therapeutics for depression.</p>	
<p>April 4, 2016 <b>Una mini-fábrica de medicamentos produce dosis continuamente</b> Se trata de un sistema modular que fabrica de forma eficiente cuatro medicamentos.</p> <p><b>Mini drug factory continuously produces doses</b> Modular system efficiently makes four approved drugs.</p>	<p>Diazepam</p>
<p>March 28, 2016 <b>Un parche de grafeno podría ayudar a los pacientes a controlar la diabetes</b> Un dispositivo portátil de doble función monitoriza el nivel de glucosa en el sudor y libera medicamentos a través de la piel.</p> <p><b>Graphene patch could help patients manage diabetes</b> Wearable, dual-function device monitors glucose in sweat and delivers drugs through skin.</p>	
<p>March 21, 2016 <b>El átomo de cesio se coordina a 16 átomos de flúor para formar un complejo que bate récords</b></p> <p><b>Cesium atom coordinates with 16 fluorine atoms in record-setting complex</b></p>	

Gracias a una colaboración con la organización española Divúlgame.org, C&EN ahora es capaz de ofrecer traducciones al español de algunos de nuestros mejores contenidos. Queremos hacer de la ciencia de vanguardia más accesible a la comunidad química de habla española, y esta es nuestra contribución. Le da a los nacidos en España, América Latina, o los EE.UU., pero cuyo primer idioma es el español la oportunidad de leer este contenido en su lengua materna. Esperamos que les guste y sea de su utilidad.



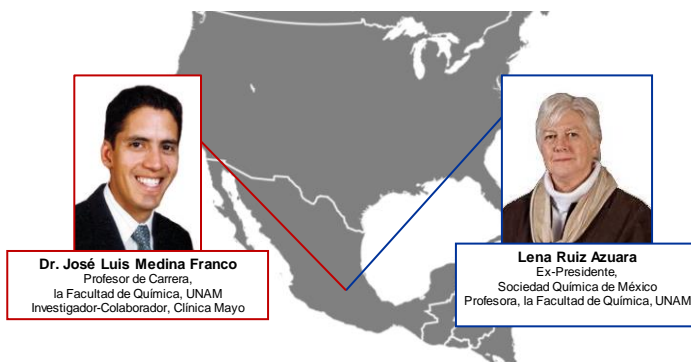
Dr. Bibiana Campos Seijo  
Editor-in-Chief of C&EN

<http://bit.ly/CENespanol>

56



## “Diseño de Fármacos por Computadora: Mitos, Realidades y Algo Más”



**Dr. José Luis Medina Franco**  
Profesor de Carrera,  
la Facultad de Química, UNAM  
Investigador-Colaborador, Clínica Mayo

**Lena Ruiz Azuara**  
Ex-Presidente,  
Sociedad Química de México  
Profesora, la Facultad de Química, UNAM

Las imágenes de la presentación están disponibles para descargar ahora

<http://bit.ly/FarmacosEspanol>

El Webinar de hoy esta auspiciado por la Sociedad Química de México y the American Chemical Society

57



## La Diversidad de la Audiencia



Hoy tenemos representantes de 17 países

58



## Sociedad Química de México



Sociedad Química de México, A.C  
"La química nos une"

Desde sus comienzos de la Sociedad Química de México, se buscaba un emblema sencillo, no demostrar partidismo alguno y significar al gremio, debería representar un símbolo no sólo para los químicos, sino también para ingenieros, farmacéuticos, metalurgistas, en fin que englobe e identifique por igual a los científicos en todas sus áreas de la ciencia química.

[www.sqm.org.mx](http://www.sqm.org.mx)

59



## La Oficina de Actividades Internacionales

American Chemical Society » Global Community » International Activities » Chapters

**Global Community**

**International Activities**

- Travel to the US
- Travel from the US
- Meetings & Activities
- Int'l Exchange & Funding
- Global Alliances & Partnerships
- Chapters**
- Science & Human Rights
- Newsletter
- ACS International Center
- International Year of Chemistry 2011

**International Chemical Sciences Chapters**

ACS works to advance the field of chemistry around the world. Scientists outside the United States have formed International Chemical Sciences Chapters (ICSCs) to allow chemists within a geographic area to connect with one another, as well as ACS members around the world. Forming a chapter brings additional benefits to international members, beyond what they already enjoy as members of ACS.

**Current Chapters:**

- Hong Kong
- Hungary
- Malaysia
- Romania
- Saudi Arabia
- Shanghai
- South Africa
- South Korea
- Thailand

**Establish a Chapter in Your Region**

ACS encourages its international members to consider forming an ICSC as a means of staying connected with scientists in their region, and with the ACS membership around the world.

[Find out how to establish an International Chemical Sciences Chapter.](#)

**ACS Network**

Connect with peers around the world on the [ACS Network!](#)

**Calendar of Events**

[C&EN Calendar](#)

**ACS in your language**

[ACS in Chinese](#)

[ACS in Spanish](#)

**Grants and Awards**

International Chapters are eligible for a number of awards and grant opportunities issued by ACS. Find out more information about them here:

[Partners for Progress and Prosperity Award](#)

[Global Innovation Grant](#)



[www.acs.org/ic](http://www.acs.org/ic)

60



Sugieran temas y expertos que les interesarían para los próximos webinars. [acswebinars@acs.org](mailto:acswebinars@acs.org)



***“Aciertos, Errores y Secretos en el Diseño de Fármacos”***

**27 de Julio, 2016 12 CDT / 1pm EDT**

**Dr. Gabriel Navarrete-Vázquez**

---

<http://bit.ly/ACS-SQMwebinars>

61