

# BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA



INSTITUTO DE FÍSICA  
“Luis Rivera Terrazas”



**SEMINARIO**  
**“DR. JESUS REYES CORONA”**

## **“Quimioinformática aplicada al desarrollo de moduladores epigenéticos”**

Dr. José Luis Medina Franco  
Departamento de Farmacia  
Facultad de Química, UNAM.

El seminario está organizado en tres partes principales. Primero se hará una breve introducción a las actividades realizadas en el grupo de Diseño de Fármacos Asistido por Computadora en la Facultad de Química - DIFACQUIM ([www.difacquim.com](http://www.difacquim.com)). En la segunda parte, después de mencionar la relación que hay entre quimioinformática con modelado molecular, se abordarán conceptos básicos de similitud molecular y relaciones estructura-actividad con un enfoque en métodos de panoramas de actividad. Aquí se enfatizará en la importancia de los acantilados de actividad (activity cliffs). En la tercera parte se discutirá la aplicación de estos conceptos al estudio de inhibidores de DNA metiltransferasas, una de las principales dianas epigenéticas. Parte de los resultados que se discutirán en el seminario están publicados en RSC Advances (2016) 5:6388263895.

**Auditorio-IFUAP**  
**Viernes 26 de agosto de 2016**  
**15:30 Hrs.**