

## USO E IMPACTO DE LA INTELIGENCIA ARTIFICIAL EN QUÍMICA MEDICINAL

SEBASTIÁN A. CORREA<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Escuela de Química y Farmacia, <sup>2</sup>Departamento de Ciencias Químicas y Biológicas,  
Facultad de Ciencias de la Salud, Universidad Bernardo O'Higgins, Santiago, Chile

E-mail: sebastian.correa@ubo.cl

El advenimiento de la inteligencia artificial (IA) ha revolucionado todas las áreas del conocimiento. Las ciencias médicas, como parte de una comunidad científica en constante evolución, necesitan reconocer el impacto transformador que la IA puede ofrecer a la medicina moderna, donde uno de los grandes desafíos es el diagnóstico y tratamiento del cáncer. El potencial de estas herramientas para generar conocimiento a partir de masivas cantidades de datos es enorme. Para la oncología de precisión, la generación de enormes datos ómicos ha permitido una comprensión más profunda de la biología y la progresión tumoral a través de tecnologías IA<sup>1</sup>.

El uso de IA también tiene un potente impacto en la educación médica, donde uno de los puntos de convergencia entre la medicina y educación química, es la química medicinal, que es la ciencia dedicada al diseño y desarrollo de fármacos que puedan utilizarse para tratar diversas enfermedades y afecciones<sup>2</sup>. La IA ofrece soluciones innovadoras a los médicos investigadores mediante técnicas de aprendizaje automático y redes neuronales. Estos algoritmos pueden analizar millones de compuestos químicos y datos biológicos, para identificar patrones y relaciones que serían difíciles de detectar por métodos tradicionales<sup>3</sup>. Los métodos tradicionales de descubrimiento de fármacos requieren mucho tiempo, tienen un elevado costo, y a menudo tardan años en identificar un posible candidato, sin dejar de lado la realización de ensayos clínicos.

La IA también se puede utilizar para optimizar las propiedades de los fármacos mediante el modelado molecular y análisis de sus propiedades fisicoquímicas, para predecir la actividad biológica y la toxicidad<sup>4</sup>. Estos modelos computacionales pueden predecir la interacción con blancos biológicos en el cuerpo humano, lo que ayuda a los científicos a seleccionar candidatos más prometedores para pruebas clínicas. Es importante destacar que el uso de IA en química medicinal no reemplaza la experiencia y el juicio de los investigadores, sino que más bien los complementa. El rol de la IA puede ser crucial para la educación médica, especialmente en la enseñanza de la química.

La IA ofrece herramientas avanzadas para visualizar estructuras moleculares y comprender la interacción entre fármacos y blancos biológicos<sup>5,6</sup>. Esto permite a los estudiantes de medicina adquirir habilidades y comprender conceptos complejos de manera más efectiva como, por ejemplo, "propiedades fisicoquímicas de los fármacos" un concepto ampliamente utilizado en cursos como química general, orgánica, fisicoquímica, farmacología, etc., pero bastante complejo de entender y asimilar por los estudiantes. Las propiedades fisicoquímicas son aquellas relacionadas con la lipofilicidad y solubilidad de los fármacos, y estas a su vez dependen de conceptos químicos básicos como son: fuerzas intermoleculares, acidez y basicidad, potenciales de reducción, coeficiente de partición, grado de ionización, etc. Al utilizar IA los estudiantes pueden modular cada uno de estos parámetros, lo

cual permite mejorar su entendimiento basado en experiencias empíricas, el análisis molecular de casos complejos desde los cursos iniciales de ciencias básicas permitirá fomentar el desarrollo de habilidades críticas y razonamiento lógico.

La aplicación de IA en la medicina y educación médica está transformando la forma en

que se descubren, desarrollan y optimizan los fármacos. Al aprovechar el poder de la IA se podrá formar médicos capaces de abordar de mejor manera los complejos desafíos de la medicina moderna y conducir al desarrollo de tratamientos más efectivos, mejorando la atención médica para todos.

## Bibliografía

1. Lüthy IA. Inteligencia artificial y aprendizaje de máquina en diagnóstico y tratamiento del cáncer *Medicina (B Aires)* 2022; 82: 798-800.
2. Holbrook SYL, Garneau-Tsodikova S. What is medicinal chemistry? – Demystifying a rapidly evolving discipline! *Med Chem Commun* 2017; 8: 1739-41.
3. Ryan DK, Maclean RH, Balston A, Scourfield A, Shah AD, Ross J. Artificial intelligence and machine learning for clinical pharmacology. *Br J Clin Pharmacol* 2024; 90: 629-39.
4. Paul D, Sanap G, Shenoy S, Kalyane D, Kalia K, Tekade RK. Artificial intelligence in drug discovery and development. *Drug Discov Today* 2021; 26: 80-93.
5. Kumar R, Sharma A, Siddiqui MH, Tiwari RK. Prediction of human intestinal absorption of compounds using artificial intelligence techniques. *Curr Drug Discov Technol* 2017; 14: 244-54.
6. Nitulescu GM. Techniques and strategies in drug design and discovery. *Int J Mol Sci* 2024; 25: 1364.