

Curso: Quimioinformática aplicada al diseño de fármacos

Validez oficial/curricular de la red SEP-CONOCER EC0301



Curso sincrónico TEAMS y/o ZOOM (7 sábados de 11:00
AM a 14:00 PM, horario CDMX)

Duración: 21 horas

Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



Masterclass (webinar): jueves 9 de enero a las
19:00 horas de CDMX

Inicia curso: 25 de enero del 2025

Profesores

Dr. José Luis Medina Franco, SNI 3

<https://www.linkedin.com/in/jose-l-medina-franco-0b653315/?originalSubdomain=mx>

M. en C. Fernanda I. Saldívar González

<https://www.linkedin.com/in/fer-sg/?originalSubdomain=mx>

M. en C. Diana L. Prado Romero

<https://www.linkedin.com/in/diana-lorena-prado-romero-87b785204/?originalSubdomain=mx>

Q.F.B. B. Raziel Cedillo González

<https://www.linkedin.com/in/raziel-cedillo/?originalSubdomain=mx>

Grupo DIFACQUIM, Departamento de Farmacia, Facultad de Química, UNAM

Descripción del curso

La Quimioinformática es una de las disciplinas que se ha convertido en un pilar durante el desarrollo y diseño de nuevos fármacos y, por lo tanto, indispensable en el menester de la Química Farmacéutica. Esta área del conocimiento permite resolver problemas en el manejo y presentación de información en química mediante la integración de diferentes conceptos, técnicas y métodos computacionales.

TEMARIO

Día 1

Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



A.- Introducción a la Quimioinformática (Conceptos básicos, historia breve, alcances, limitaciones. Semejanzas y diferencias con Química Teórica, Modelado Molecular y Bioinformática).

B.- Representación molecular (Introducción a las representaciones moleculares más comunes de compuestos orgánicos de bajo peso molecular y a sus aplicaciones en diversos contextos).

C.- Representación molecular (Uso de representaciones lineales, bi y tridimensionales (2D y 3D) para filtrar bases de datos químicas y visualizar moléculas con características específicas).

Día 2

A.- Introducción a las bases de datos moleculares (Panorama general de las bases de datos moleculares y búsquedas en los servidores en línea disponibles).

B.- Adquisición de información química de bases de datos moleculares públicas (Minería en la base de datos de PubChem mediante programación).

Día 3

A.- Adquisición de información química de bases de datos moleculares públicas (Minería en la base de datos de ChEMBL mediante programación).

Día 4

Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



A.- Análisis y visualización de información química (Cálculo de descriptores moleculares. Gráficos de una propiedad y análisis de asociación y correlación entre variables).

Día 5

A.- Espacio químico (Conceptos y aplicaciones de espacio químico).

B.- Espacio químico (Técnicas de visualización del espacio químico).

Día 6

A.- Similitud química (Concepto de similitud química).

B.- Similitud Química (Aplicaciones del concepto de similitud química: Búsqueda de compuestos, Relaciones estructura-actividad, Panoramas de actividad).

Día 7

A.- Enumeración de bibliotecas químicas (Uso de SMARTS y SMIRKS para codificar reacciones y transformaciones químicas).

Evaluación final del curso

inversión: \$ **1,699.00 MXN** (80.00 USD). Para inscribirse hacer pago a la cuenta CLABE SANTANDER: 0141-8065-5079-1315-04, a nombre de Pharmaceutical and Biotechnological Innovation Services SAS De CV. El comprobante se manda al correo: pharmaceuticalandbiotechnology@gmail.com. También puede pagar en: <https://bit.ly/3tPTDre> por **PayPal**, MERCADO PAGO (TDD, TDC, OXXO, etc) o stripe. Descuentos 10 % estudiantes de licenciatura, haber tomado 2 o más cursos/diplomados en pharbiois. 5 % estudiantes de Posgrado y posdocs, profesores de tiempo parcial, haber tomado un curso en pharbios.com.

Comentarios de alumnos que ha tomado el curso

Fresno Norte No 14. San Miguel Tehuisco, Alcaldía Tlalpan C.P.14500
pharmacologicalandbiotechnology@gmail.com

Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV

www.pharbiois.com



Fresno Norte No 14. San Miguel Tehuisco, Alcaldía Tlalpan C.P.14500
pharmacologicalandbiotechnology@gmail.com