



Registro RENIECYT-CONAHCYT: 2000001

# CURSO: MODELADO MOLECULAR

ON LINE asincrónico (<https://www.rcampus.com/>)

En proceso de registro en la red SEP-CONOCER: ECO301 y ECO217

**Duración: 30 horas**

*programa: actualizado*



**Profesor: Dr José Correa Basurto, SNI-3**

<https://www.linkedin.com/in/jose-correa-basurto-23721b43/>

3 clases por semana (lunes)

**Inicio: 13 de mayo del 2024**



### **Acerca del curso**

Es un curso que ofrecerá conceptos sobre bioinformática estructural que va desde grupos funcionales, estructura de proteínas, además de ver conceptos sobre mecánica molecular, mecánica cuántica, acoplamiento molecular o docking ligando-proteína, proteína-proteína, plegamiento de proteínas, dinámica molecular.

### **TEMARIO**

1. Presentación del curso (exámen diagnóstico)
2. Grupos Funcionales, Cargas atómicas, conformación y configuración, LogP, Efectos electrónicos y estéricos
3. Descriptores químicos y QSAR
4. Descripción de aminoácidos y Estructura de proteínas
5. Conceptos de inmuno-informática
6. Diseño de fármacos considerando propiedades ADMET, virtual screening, PCAs y Drug screening workflow systems
7. Mecánica molecular (generalidades)
8. Métodos semi-empíricos y Mecánica cuántica
9. Conceptos de folding (plegamiento de proteínas)
10. Docking ligando-proteína
11. Docking macromolecular-macromolécula (proteína-proteína)
12. Dendrímeros como nano-acarreadores
13. Principios básicos de Dinámica molecular
14. Taller docking (acoplamiento Molecular) (actividad final)
15. Taller de dinámica molecular con VMD-NAMD (actividad final)

# Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV

www.pharbiois.com



**Nota:** Se califica con actividades en rcampus.com (70%) y ejercicio final (30%), la constancia se entrega con calificación numérica de 1-10.

**COSTO, \$ 1,399.00 MXN (80 USD)**

Para inscribirse en México hacer el pago en cuenta CLABE SANTANDER: 0141-8065-5079-1315-04. Para pagos fuera de México y en México tenemos plataformas: <https://bit.ly/46CxZVT> (**PayPal o MERCADO PAGO o stripe**), a nombre de Pharmaceutical and Biotechnological Innovation Services SAS De CV. El comprobante se manda al correo: [pharmaceuticalandbiotechnology@gmail.com](mailto:pharmaceuticalandbiotechnology@gmail.com). Descuentos 10 %: alumnos de licenciatura, haber tomado 1 diplomado o 2 cursos en pharbiois. Descuentos 5 %: alumnos de Posgrado, posdocs, investigadores jóvenes de tiempo parcial, haber tomado un curso con pharbios.com.

## Opiniones de usuarios

- Respecto al contenido y a la plataforma de uso es de mucha utilidad y existe bastante retroalimentación por parte del profesor y de los participantes.
- Excelente curso, los temas presentados estuvieron conforme al programa, las actividades fueron buenas y siempre con respuesta del Dr
- Vi una gran cantidad de conceptos de muchas áreas que apoyan el Modelado molecular