

Pharmaceutical and Biotechnological  
Innovation-Services SAS de CV

www.pharbiois.com



Registro RENIECYT-CONAHCYT: 2000001

# Curso: Quimioinformática aplicada al diseño de fármacos



**Curso sincrónico TEAMS (7 sábados de 11:00 AM a  
14:00 PM, horario CDMX)**

**Duración: 21 horas**

**Inicia: 3 de agosto del 2024**

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



## 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

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

# Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV

www.pharbiois.com



**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

**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).

# Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV

www.pharbiois.com



**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: \$ **1,499.00 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](mailto: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**