

# Exploración *in silico* | 3ra edición

Química Digital para Democratizar la Búsqueda de Fármacos

---

## A. Información general

Facilitador: Dr. Jesus Alvarado Huayhuaz

Modalidad: Teórico-práctica

Duración total: 12 horas

Horario: 7 a 9 pm, los lunes, miércoles y viernes 12, 14, 16, 19, 21, 23 de enero.

Público objetivo: Químicos, biólogos, farmacéuticos, médicos, microbiólogos y áreas afines.

### Notas Importantes:

- ✓ El curso es completamente **gratuito** y se brinda de forma **virtual**.
- ✓ **Inscripción** al curso. Hasta el **viernes 9 de enero del 2026**, adjuntar los siguientes documentos en el formulario: <https://forms.gle/f8PGh99qyzgMNcVd9>
  1. Currículo vitae no documentado
  2. Carta de motivación
  3. Carta de recomendación
- ✓ Los estudiantes seleccionados serán informados hasta el domingo 11/01/2026
- ✓ No se requiere hacer instalaciones en tu computadora, todo se trabaja en la nube.
- ✓ Se entrega certificado a quienes obtengan notas iguales o superiores al 80 % de las evaluaciones y asistan al 80 % de las sesiones.
- ✓ Las sesiones se transmitirán por Youtube y Tiktok. Las grabaciones son de libre acceso y de forma permanente.

## B. Temario

### Sesión 1: Fundamentos de Química Digital y Representación Molecular (2 h)

- Brechas en la accesibilidad a estudios computacionales
- Introducción a la exploración *in silico*
- Dibujo de moléculas en Avogadro
- Representación SMILES
- Actividad práctica guiada

## **Sesión 2: Estructuras Tridimensionales y Visualización Molecular (2 h)**

- Optimización de estructuras 3D
- Visualización 3D de proteínas
- IA para generación 3D: Molsimplify, AlphaFold
- Actividad práctica guiada

## **Sesión 3: Inteligencia Artificial y Procesamiento Molecular (2 h)**

- IA en química computacional
- Python y RDKit
- Cálculo de descriptores moleculares
- Actividad práctica guiada

## **Sesión 4: Acoplamiento Molecular Clásico e Inteligente (2 h)**

- Fundamentos del docking
- AutoDock Vina
- Interpretación de resultados
- IA aplicada al docking

## **Sesión 5: Desarrollo de Proyecto Libre y Automatización (2 h)**

- Propuesta de proyectos por grupos
- Integración de herramientas vistas
- Despliegue de aplicaciones web con Streamlit
- Introducción a agentes IA
- Asesoría y trabajo guiado por equipos

## **Sesión 6: Presentación de Proyectos Finales (2 h)**

- Presentación de proyectos por grupos
- Discusión técnica
- Retroalimentación
- Cierre del curso