

FARMACOINFORMÁTICA

David Ramírez

dramirezs@udec.cl

Web lab: ramirezlab.github.io



*Pharmacoinformatics & Drug Design Lab
Departamento de Farmacología
Facultad de Ciencias Biológicas
Universidad de Concepción*



FARMACOINFORMÁTICA



David Ramírez
dramirezs@udec.cl
Web lab: ramirezlab.github.io



Monitoras:

Claudia Martinez
camartinezga@unal.edu.co

Laura González
laura.gonzalezc@javeriana.edu.co



Ramírez Lab

Farmacoinformática:

Disciplina donde la tecnología juega un papel fundamental en los aspectos que involucran el ciclo del medicamento, desde las ciencias básicas para el descubrimiento de nuevas moléculas bioactivos, pasando por manufactura hasta llegar a ensayos clínicos y farmacovigilancia.

Descripción:

La asignatura de carácter teórico-práctico y tiene como principal objetivo presentar herramientas computacionales para optimizar los procesos de diseño, optimización y selección de compuestos bioactivos con potencial terapéutico. El curso se orienta en el empleo de métodos computacionales desde el uso de bases de datos de interés farmacéutico, químico, biológico y medicinal, pasando por herramientas para estudiar los mecanismos moleculares de la interacción de un ligando con su respectivo receptor, hasta la aplicación de algoritmos de aprendizaje automático para crear modelos que permitan ayudar en la toma de decisiones cuando se requiera diseñar y/o optimizar una entidad química. Incluyendo el uso de nuevas tecnologías para enfrentar los desafíos del proceso de diseño de fármacos.

Contenidos

Sesión Teórica I: Martes 03 de octubre		
17:00 – 17:15	00	Presentación e introducción
17:15 – 18:00	01	Nociones básicas sobre el uso de computadoras para el diseño de fármacos.
18:00 – 18:45	02	Uso de sistema operativo Unix y lenguaje de programación Python / KNIME en diseño de fármacos.
18:45 – 19:00	Break	
19:00 – 20:00	03	Representación, visualización y modelamiento molecular de compuestos bioactivos y macromoléculas. Uso de PyMol y VMD.
Sesión Teórica II: Jueves 05 de octubre		
17:00 – 18:00	04	Bases de datos de interés farmacéutico, químico, biológico y medicinal.
18:00 – 19:00	05	Métodos biofísicos para obtención de macromoléculas
19:00 – 19:15	Break	
19:15 – 20:00	06	Diseño de fármacos basado en el ligando I

Sesión Teórica III: Lunes 09 de octubre		
17:00 – 18:00	06	Diseño de fármacos basado en el ligando II
18:00 – 18:45	07	Modelamiento de Farmacóforos
18:45 – 19:00	Break	
19:00 – 20:00	08	Diseño de fármacos basado en la estructura I
Sesión Teórica IV: Miércoles 11 de octubre		
17:00 – 18:00	08	Diseño de fármacos basado en la estructura II
18:00 – 18:45	09	Farmacología de sistemas I
18:45 – 19:00	Break	
19:00 – 19:45	09	Farmacología de sistemas II
19:45 – 20:00	Clausura curso Farmacoinformática – sesiones teóricas.	

Sesión Práctica I: <u>Viernes</u> 13 de octubre		
7:00 – 8:30	01	Adquirir y analizar datos de <u>ChEMBL</u> - Python
8:30 – 10:00	02	Adquirir y analizar datos de <u>ChEMBL</u> - KNIME
10:00 – 10:30	Break	
10:30 – 11:30	03	Visualización datos - Python
11:30 – 13:00	04	<u>Farma</u> /quimio informática - KNIME
Sesión Práctica I: <u>Viernes</u> 13 de octubre		
7:00 – 8:30	05	Cribado Virtual Basado en el Ligando – Machine Learning - Python
8:30 – 10:00	06	Virtual Screening – ZINC <u>Pharmer</u>
10:00 – 10:30	Break	
10:30 – 11:30	07	Docking Molecular – <u>Smina</u> - <u>Pyhton</u>
11:30 – 12:45	08	Redes de interacción proteína-ligando - <u>CytoScape</u>
12:45 – 13:00	Clausura curso Farmacoinformática – sesiones prácticas.	

Requisitos

Instalación de software gratuito:

KNIME: <https://www.knime.com/>

CytoScape: <https://cytoscape.org/>

MobaXterm: <https://mobaxterm.mobatek.net/>

Pymol: <https://pymol.org/2/>

Software (gratuito) opcional a instalar para optimizar clases:

CONDA (o versiones):

<https://docs.conda.io/projects/conda/en/latest/user-guide/install/index.html>

VMD: <https://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>

Maestro (Académico):

<https://www.schrodinger.com/products/maestro>