

Farmacoinformática 2023

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: Viernes 13 de octubre		
7:00 – 8:30	01	Adquirir y analizar datos de ChEMBL - Python
8:30 – 10:00	02	Adquirir y analizar datos de ChEMBL - KNIME
10:00 – 10:30	Break	

10:30 – 11:30	03	Visualización datos - Python
11:30 – 13:00	04	Farma/quimio informática - KNIME
Sesión Práctica I: Viernes 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 Pharmer
10:00 – 10:30	Break	
10:30 – 11:30	07	Docking Molecular – Smina - Pyhton
11:30 – 12:45	08	Redes de interacción proteína-ligando - CytoScape
12:45 – 13:00	Clausura curso Farmacoinformática – sesiones prácticas.	