



Programa Superior Universitario en Bioinformática Aplicada al Desarrollo de Fármacos

Créditos: **12 ECTS** | Modalidad: **online**

Objetivos

Este curso tiene el objetivo de ser una formación complementaria al Máster Universitario en Bioinformática, proporcionando las habilidades y el conocimiento necesario para aplicar técnicas computacionales avanzadas en el descubrimiento y diseño de fármacos.

¿A quién va dirigido?

Este programa está dirigido a profesionales de la salud, investigadores y personas interesadas en la industria farmacéutica. Es ideal para quienes desean adquirir competencias en el modelado molecular para el diseño de fármacos, integrando herramientas computacionales biofísicas y técnicas de inteligencia artificial en el descubrimiento y optimización de nuevas moléculas con potencial terapéutico.

Plan de estudios

Tema 1. Principios de química para el diseño de fármacos

Descubre cómo la química medicinal aplica los conocimientos de diferentes ciencias para comprender las propiedades e interacciones moleculares de los medicamentos en relación a su diana farmacéutica.

Tema 2. Introducción al descubrimiento de fármacos

Conoce el papel de la fase computacional en la optimización de moléculas, conociendo las regulaciones farmacéuticas y descubriendo casos de éxito en el diseño asistido por computadora.

Tema 3. Quimioinformática para el descubrimiento de fármacos: bases de datos, formatos comunes y librerías

Aprende a manejar bases de datos de compuestos (ZINC, PubChem, DrugBank), utilizar formatos de representación (SMILES, PDB, SDF), y aplicar herramientas computacionales para modelar y analizar moléculas en el desarrollo de fármacos.

Tema 4. Cribado Virtual basado en el ligando

Utiliza técnicas de cribado virtual para identificar compuestos prometedores, analizando su similitud molecular y actividad.

Tema 5. Cribado virtual basado en la estructura (I)

Aplica conocimientos biofísicos y de inteligencia artificial para predecir la estructura tridimensional de compuestos activos y de los objetivos farmacológicos.

Tema 6. Cribado virtual basado en la estructura (II)

Te familiarizarás con varias herramientas de acoplamiento molecular (VINA, QVINA2, SMINA, QVINAW, GalaxyDock3, ZDOCK, PLANTS, AUTODOCK4), aprendiendo sus aspectos básicos, ejemplos de uso para analizar los potenciales sitios de interacción de los nuevos fármacos en relación a sus moléculas dianas.

Tema 7. Dinámica molecular para la comprensión de las interacciones moleculares: AMBER, CHARMM y GROMACS con OPENMM

Realiza simulaciones de dinámica molecular con estas herramientas, explorando el uso de campos de fuerza y su aplicación en el estudio de interacciones biomoleculares.

Tema 8. Inteligencia artificial aplicada al descubrimiento de fármacos de molécula pequeña

Explora cómo la IA transforma el diseño de fármacos, comprendiendo su papel en la predicción de propiedades farmacológicas y la optimización de compuestos.

Tema 9. Inteligencia artificial aplicada al descubrimiento de fármacos peptídicos

Comprende cómo la IA asiste en el diseño de fármacos peptídicos, prediciendo sus propiedades terapéuticas, como la acción anticancerígena, antibacteriana y antiinflamatoria.

Resultados de aprendizaje

Al finalizar el curso serás capaz de:

- Analizar los aspectos moleculares de la interacción de moléculas con sus dianas biológicas.
- Aplicar los métodos computacionales al descubrimiento y diseño de nuevas moléculas útiles para la industria farmacéutica.
- Aplicar de manera efectiva métodos y técnicas del modelado molecular a problemas de diseño molecular.
- Analizar los nuevos avances en inteligencia artificial y aprendizaje automático en diferentes partes del proceso de descubrimiento de fármacos.



100% online



Clases en directo



Mentor-UNIR



unir.net

Infórmate:

info@unir.net

+34 941 209 743