

Barranquilla - Colombia

▶ Curso de

# DISEÑO DE FÁRMACOS ASISTIDO POR COMPUTADORA

## Inscripciones Abiertas



**Modalidad:**  
Presencial / Virtual



**Duración:**  
20 horas



**Inversión:**

Estudiantes: \$450.000

Egresados: \$480.000

Particulares: \$500.000



**ESCANEA EL CÓDIGO  
O INGRESA AL  
LINK DE INSCRIPCIÓN**

<https://forms.office.com/r/mK7R49ZSTf?origin=lprLink>

**MAYOR INFORMACIÓN**

Oficina de Educación Continuada  
E-mail: [ingrid.gonzalez@unilibre.edu.co](mailto:ingrid.gonzalez@unilibre.edu.co)



**UNIVERSIDAD  
LIBRE®**  
Vigilada Mineducación



Dirección de  
Educación Continuada -  
**Facultad de Ciencias de  
La Salud, Exactas y Naturales  
Posgrado**

Curso de

# DISEÑO DE FÁRMACOS ASISTIDO POR COMPUTADORA

## OBJETIVO GENERAL

Brindar a los participantes los conocimientos teóricos y las habilidades prácticas necesarias para aplicar herramientas de modelado molecular en el diseño de fármacos, con un enfoque orientado a la investigación en química, biotecnología y ciencias biomédicas.

## OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Analizar estructuras proteicas utilizando herramientas de modelado molecular.
- Facilitar el estudio y el análisis de datos químicos mediante docking molecular y herramientas de quimioinformática.
- Evaluar la estabilidad y comunicar visualmente los resultados a través de la representación tridimensional y la comprensión de conceptos asociados a la dinámica molecular.
- Aplicar los conceptos fundamentales de la dinámica molecular mediante el uso de herramientas como GROMACS y CHARMM-GUI para preparar sistemas biomoleculares, analizar trayectorias y evaluar parámetros estructurales y energéticos (RMSD, RMSF, radio de giro, SASA, enlaces de hidrógeno, energía cinética), con el fin de interpretar la estabilidad y comportamiento de complejos proteína-ligando en un entorno simulado.

## DESCRIPCIÓN BREVE

Enfoque práctico e interdisciplinario, que combina sesiones teóricas con talleres presenciales, permitiendo desarrollar habilidades clave en la toma de muestras, análisis citológico, hematológico y parasitológico, así como en la interpretación clínica de los resultados.

Con el acompañamiento de expertos en áreas fundamentales del diagnóstico animal, el curso ofrece herramientas para mejorar la toma de decisiones en la

práctica veterinaria, de manera más precisa, eficiente y comprometida con el bienestar animal.

## PÚBLICO OBJETIVO

Médicos veterinarios, bacteriólogos, microbiólogos, biólogos, estudiantes de último semestre, egresados de programas afines e integrantes del personal relacionado.

## CONTENIDO PROGRAMÁTICO

### Sesión 1: Docking molecular e inteligencia artificial

Introducción al modelado molecular, preparación de proteínas y ligandos, validación del docking mediante self-docking y cross-docking con AutoDock Vina y AutoDock4. Uso de herramientas de inteligencia artificial como Glna y DiffDock en Google Colab para el análisis automatizado de interacciones ligando-proteína.

### Sesión 2: Caracterización, evaluación y optimización de compuestos

Uso de DataWarrior y ADMETLab, aplicación de técnicas de optimización estructural como reemplazos isostéricos y bioisostéricos, y minimización energética con ArgusLab y Avogadro.

### Sesión 3: Visualización y comunicación científica

Exploración de herramientas de visualización molecular como PyMOL, Chimera y ChimeraX para generar imágenes de calidad. Uso de plataformas como Protein Imager 3D y Canva para diseñar material gráfico, incluyendo pósters científicos e infografías.

### Sesión 4: Simulación y análisis de dinámica molecular

Preparación de sistemas para dinámica molecular utilizando CHARMM-GUI, destacando la importancia de la parametrización. Análisis de trayectorias mediante métricas como RMSD, RMSF, radio de giro, SASA, enlaces de hidrógeno y energías, usando QTGrace para su visualización.

**FECHA DE INICIO:**

Por definir de acuerdo al número de estudiantes matriculados

## MAYOR INFORMACIÓN

Oficina de Educación Continuada  
E-mail: [ingrid.gonzalez@unilibre.edu.co](mailto:ingrid.gonzalez@unilibre.edu.co)



**UNIVERSIDAD LIBRE**  
Vigilada Mineducación



Dirección de Educación Continuada -  
**Facultad de Ciencias de La Salud, Exactas y Naturales Posgrado**