



CURSO PRE-CONGRESO

Automatización y Quimioinformática de Productos Naturales

C.M.C. Erick Odin Gonzalez Helguera

Modalidad
En línea

Duración
20 horas

Formato
Teórico-Práctico

Objetivo

Capacitar a los participantes en la implementación de flujos de trabajo computacionales integrando las siguientes herramientas clave:

- **RDKit:** Estándar industrial para la manipulación, visualización y análisis de estructuras químicas.
- **Pandas:** Ciencia de datos para la gestión y filtrado de grandes volúmenes de información molecular.
- **Matplotlib:** Generación de gráficos estadísticos para la interpretación de espacios químicos.
- **PubChemPy:** Automatización de búsquedas y extracción de datos desde repositorios públicos.

**Se abordará brevemente NumPy como el motor matemático subyacente.*

El curso proporciona un Kit de Herramientas Computacionales para ejecutar tareas complejas como la generación de librerías virtuales y el filtrado molecular, asegurando la reproducibilidad de los resultados.

Perfil de Ingreso

Dirigido a estudiantes de nivel licenciatura o superior (Posgrado/Profesionales) en áreas afines: Química, Farmacia, Biología, Bioquímica o Ingeniería Química. Interés en el desarrollo de fármacos y herramientas computacionales.

Requisitos Computacionales

Memoria RAM	Mínimo 4 GB (Requerido para navegador web)
Conectividad	Conexión a Internet estable (Entorno en la Nube)
Sistema Operativo	Windows, macOS o Linux (Cualquiera con navegador moderno)
Plataforma	Google Colab (Requiere cuenta de Google activa)
Software	No se requiere instalación local de software

**Se proporcionará guía de navegación y material de trabajo digital.*

Temario Teórico-Práctico



Fundamentos

1. Introducción a la Quimioinformática Práctica
2. Minería de datos: PubChem (Automatizado)
3. Formatos químicos: SMILES, SDF, MOL
4. Dibujo y visualización molecular 2D/3D
5. Extracción de estructuras (Minería de Texto)
6. Reacciones Virtuales (Química Combinatoria)

Métodos Computacionales

1. Cálculo automático de propiedades (LogP, MW)
2. Reglas de filtrado (Lipinski, Veber)
3. Búsqueda de subestructuras químicas
4. Similitud molecular y Clustering

Perfil de Egreso

Al finalizar el curso, los participantes serán capaces de aplicar estas herramientas computacionales para optimizar la gestión y el análisis de datos en proyectos de investigación. Adquirirán competencias prácticas en la extracción automatizada de información, el análisis del espacio químico, la simulación de reacciones virtuales y la aplicación de filtros ADME/Tox, permitiéndoles acelerar de manera efectiva la selección y priorización de candidatos bioactivos.



“Nos vemos
en Puebla...”

