



UNIVERSIDAD DE CHILE
FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS Y FARMACÉUTICAS
ESCUELA DE POSTGRADO

CURSO DE POSTGRADO

MODELACIÓN MOLECULAR PARA EL DISEÑO DE FÁRMACOS

Semestre

1º

Año

2025

Prof. Encargado

Coordinador David Vásquez Velasquez

Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas

UNIDAD ACADÉMICA

Teléfono

+56 2 2978 2887

E-mail

dvasquez@ciq.uchile.cl

Tipo de Curso

Avanzado

Clases	13
Seminarios	4 seminarios
Evaluaciones	1 por cada seminario
Trabajos	1 por cada seminario

Nº horas Presenciales	52
Nº horas No Presenciales	56
Nº horas totales	108 (viene de 4 x 27 horas)

Créditos

4

(1 Crédito Equivale a 27 Horas Semestrales)

CUPO
ALUMNOS

1

10

Pre-requisitos

Grado universitario en
Ciencias Químicas, Biológicas, Médicas o afines.

Inicio

mayo 2023

 Término

julio 2023

Día/horario por sesión

Definido en común acuerdo entre Académicos y estudiantes
--

Lugar y contacto

Facultad: Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas Edificio Profesores Eméritos(EPEs) :Dr. Carlos Lorca Tobar 964, Independencia. Contacto en la Escuela de Posgraduados Francisca Moraga posgrado3@ciq.uchile.cl Teléfonos: +56 2 29782959; +56 2 29782957
--

OBJETIVO DEL CURSO

Al finalizar el curso, el estudiante será capaz de aplicar herramientas de modelación molecular y machine learning (ML) en el contexto del diseño racional de moléculas con potencial actividad biológica. Para ello, el curso aborda el manejo de bases de datos químicas y biológicas, junto con los criterios necesarios para la validación estructural de modelos tridimensionales. Se profundizará en la construcción y análisis de estructuras moleculares, así como en el estudio de interacciones intra e intermoleculares tanto en moléculas aisladas como en complejos ligando-receptor. Además, el estudiante conocerá los fundamentos y aplicaciones del aprendizaje automático para identificar patrones estructurales y optimizar compuestos bioactivos, integrando descriptores moleculares derivados de técnicas computacionales avanzadas.

- **TEMA I: Bases de datos y validación de los modelos 3D.**
- **TEMA II: Modelamiento de estructuras y estudio de interacciones moleculares.**
- **TEMA III: Modelación molecular en complejos ligando-receptor.**
- **TEMA IV: Uso de Machine Learning (ML) en el Diseño de moléculas bioactivas.**

METODOLOGÍA

El curso se desarrolla a través de clases expositivas dictadas por docentes especialistas en las áreas de modelación molecular, análisis estructural y machine learning aplicado al diseño de moléculas bioactivas. Estas clases entregan los fundamentos teóricos y prácticos necesarios para comprender y aplicar las herramientas computacionales abordadas.

Complementariamente, se realizarán seminarios aplicados en los que los estudiantes trabajarán con casos específicos, integrando progresivamente los contenidos del curso. Cada seminario culminará con la entrega de un informe técnico, en el que el estudiante deberá analizar, discutir y justificar sus resultados, reforzando así el pensamiento crítico y el razonamiento científico.

Como actividad final, el curso contempla el desarrollo de un proyecto de investigación individual o grupal basado en un caso real o simulado de diseño molecular. Este proyecto integrará el uso de bases de datos, modelación de estructuras, simulaciones de interacciones moleculares y aplicación de técnicas de machine learning. El trabajo se presentará mediante un informe escrito y una exposición oral, donde el estudiante deberá argumentar la pertinencia de las herramientas utilizadas y la validez de sus resultados.

EVALUACIÓN

4 Seminarios (25% cada uno)

Profesores Participantes por Unidad Académica

Universidad de Chile - Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas.

Prof. David Vásquez V. (dvasquez@ciq.uchile.cl)

Prof. Gerald Zapata (gzapata@uchile.cl)
--

Prof. Pablo César Jaque Olmedo (pablo.jaque@ciq.uchile.cl)

ESTATUS DEL CURSO EN PROGRAMAS DE POSTGRADO

Curso Electivo para los alumnos del Doctorado en Farmacología de la Universidad de Chile (4 créditos).

BIBLIOGRAFÍA

TEMA: Estudios de dinámica molecular y sus aplicaciones.

- Libro: Rapaport, Dennis C., and Dennis C. Rapaport. *The art of molecular dynamics simulation*. Cambridge university press, 2004.
- Libro: Roux, Benoît. *Computational Modeling and Simulations of Biomolecular Systems*. Word Scientific. 2022.
- Artículo científico: Karplus, Martin, and J. Andrew McCammon. "Molecular dynamics simulations of biomolecules." *Nature structural biology* 9.9 (2002): 646-652.
- Artículo científico: Hollingsworth, Scott A., and Ron O. Dror. "Molecular dynamics simulation for all." *Neuron* 99.6 (2018): 1129-1143.

CRONOLOGÍA DEL CURSO

TEMA I: Bases de datos y validación de los modelos 3D			
1	28 de mayo 11:30-13:45 h	Técnicas de obtención de modelos tridimensionales.	Gerald Zapata
2	4 junio 08:30 – 13:00 h	Métodos de validación de los modelos tridimensionales	Gerald Zapata
3	11 junio 08:30 – 13:00 h	SEMINARIO 1	Gerald Zapata
TEMA II: Modelamiento de estructuras y estudio de interacciones moleculares			
4	18 junio 08:30 – 13:00 h	Modelamiento químico cuántico de sistemas de interés biológico, P. Ej. fármacos y péptidos	Pablo Jaque Gerald Zapata
5	25 junio 08:30 – 13:00 h	Herramientas interpretativas para identificar interacciones intra e intermoleculares: Potencial Electrostático Molecular (MEP), Índice de interacciones no-covalentes (NCI)/ SEMINARIO 2	Pablo Jaque Gerald Zapata
TEMA III: Modelación molecular en complejos ligando-receptor			
8	2 julio 08:30 – 13:00 h	Modelos clásicos de acoplamiento molecular (docking) / Interpretación de resultados	Gerald Zapata Pablo Jaque
9	9 julio 08:30 – 13:00 h	SEMINARIO 3	Gerald Zapata Pablo Jaque
TEMA IV: Uso de Machine Learning (ML) en el Diseño de moléculas bioactivas			
10	22 julio 08:30 – 13:00 h	Introducción al ML	David Vásquez
11	23 julio 08:30 – 13:00 h	Análisis y creación de datasets Creación de flujos con operadores	David Vásquez
12	29 julio 08:30 – 13:00 h	ML supervisado HTVS con ML Optimización de modelos	David Vásquez
13	30 julio 08:30 – 13:00 h	SEMINARIO 4 (Proyecto ML)	David Vásquez