

# **Alejandro Crespo**

*Modeling and Informatics, MSD, USA*

En esta charla se resumirán algunas aplicaciones de química computacional y quimioinformática en el proceso de diseño de drogas en la industria farmacéutica. En la primera parte presentaremos una evaluación sistemática para correlacionar la actividad biológica con energías de unión de ligandos a proteínas calculadas por métodos basados en la mecánica cuántica. En la segunda parte describiremos un análisis informático para establecer la correlación in vitro/in vivo de la eliminación intrínseca hepática y aplicaciones de modelado molecular de dichas propiedades farmacocinéticas.