

Carácter del curso	Electiva curricular
Semestre en que se dicta	Impar
Número de créditos	9
Carga horaria semanal (hs)	Clases Teóricas: 26 hs (13 clases) Clases prácticas : 12 talleres : 24 horas Clases laboratorio (proyecto integrador): 28 horas Preparación Proyecto Integrador: 8 hs Pruebas (escrita y exposición): 4
Previaturas	Para estudiantes de Química: Mat. 01, Mat. 02 o Mat. 03, Física 101, Farmacología (previa o simultanea) y Qca. Farmacéutica 101 (previa o simultanea). Estudiantes extranjeros: conocimientos básicos de Bioinformática, Biología Molecular, Bioquímica, Matemáticas y Fisicoquímica
Cupo	20

Estructura Responsable:

Centro de Bioinformática Estructural (CEBIOINFO), DETEMA

Docente Responsable:

Margot Paulino

Docentes Referentes:

Federico Iribarne

Objetivos:

Reconocer la importancia del diseño de drogas en el proceso del descubrimiento de nuevos fármacos

Capacitar al alumno para que desarrolle competencias y habilidades que le permitan estudiar y conocer los principios básicos de la Farmacoquímica Molecular dirigida al diseño de nuevas moléculas con actividades biológicas interesantes.

Capacitar al alumno para que desarrolle competencias y habilidades que le permitan describir las propiedades fisicoquímica (electronicas, hidrofóbicas, estéricas) asociadas a la estructura que definen tales actividades.

Contenido:

Temas:

1. DISEÑO DE COMPUESTOS BIOACTIVOS
2. MEDIDAS DE ACTIVIDAD BIOLÓGICA. CONCEPTO DE ESPECIFICIDAD.
3. CAMPOS DE FUERZA
4. MINIMIZACIÓN DE ENERGÍA
5. *TALLER: INICIACION MOE, MODELADO MOLECULAR Y MINIMIZACIÓN DE ENERGÍA*
6. ANALISIS CONFORMACIONAL
7. *TALLER: CONSTRUCCION Y ANALISIS DE BARRERAS TORSIONALES.*
8. *TALLER: ANALISIS CONFORMACIONAL SISTEMÁTICO Y ALEATORIO*
9. ALINEAMIENTO FLEXIBLE DE PEQUEÑAS MOLECULAS
10. *TALLER: ALINEAMIENTO DE PEQUEÑAS MOLECULAS*
11. DESCRIPTORES 2D Y 3D DE PEQUEÑAS MOLÉCULAS
12. *TALLER: CALCULO DE DESCRIPTORES Y CONSTRUCCION DE BASES DE DATOS*
13. FARMACÓFORO Y ESQUEMAS FARMACOFÓRICOS
14. PRINCIPIOS BASICOS PARA OBTENCION DE FARMACÓFOROS
15. *TALLER FARMACÓFOROS*
16. *TALLER FARMACÓFOROS CONSENSO*
17. TAMIZAJE VIRTUAL. ALGORITMOS
18. *TALLER: TAMIZAJE VIRTUAL*
19. MODELOS QSAR
20. *TALLER: CONSTRUCCION DE QSAR POR METODOS CLÁSICOS*
21. HUELLAS DACTILARES.
22. *TALLER: CONSTRUCCION DE MODELOS QSAR EN BASE A HUELLAS DACTILARES*
23. *TALLER: CONSTRUCCION DE MODELOS QSAR MULTIVARIANTES (AUTOQUASAR)*
24. ALGORITMOS GENERICOS
25. *TALLER: CONSTRUCCION DE MODELOS QSAR USANDO ALGORITMOS GENETICOS*

Bibliografía:

A ser recomendada al comenzar el curso, basada en libros de texto disponibles en biblioteca de la Facultad de Química, y CeBioinfo-DETEMA.

Se recomienda además tomar contacto con los siguientes artículos científicos:

[1] Lloyd DG, Golfis G, Knox AS, Fayne D, Meegan MJ, Oprea TI, Oncology Exploration: Charting Cancer Medicinal Chemistry Space, Drug Discov Today. 2006 Feb;11(3-4):149-159.

[2] Knox AS, Meegan MJ, Carta G, Lloyd DG, Considerations in Compound Database Preparations Hidden Impact on Virtual Screening Results, J Chem Inf Model. 2005 Nov-Dec;45(6):1908-19

[3] Dean PM, Lloyd DG, Todorov NP. De novo drug design: integration of structure-based and ligand-based methods. Current Opinion in Drug Discovery and Development. 2004 7(3):347-353

[4] Lloyd DG, Buenemann CL, Todorov NP, Manallack DT, Dean PM. Scaffold hopping in de novo design – ligand generation in the absence of receptor information. Journal of Medicinal Chemistry, 2004 Jan 29;47(3):493-96

[5] Howarth J, Lloyd DG. Redox systems as conduits for antimalarial compounds Journal of Antimicrobial Chemotherapy 2001 47: 122-124

[6] H. Cerecetto, R. Di Maio, M. Gonzalez, M. Risso, G. Sagrera, G. Seoane, A. Denicola, G. Peluffo, C. Quijano, A. O. M. Stoppani, M. Paulino, C. Olea-Azar, M. A. Basombrío. Synthesis and anti-trypanosomal evaluation of E-isomers of 5-nitro-2 furaldehyde and 5-nitrothiophene-2- carboxaldehyde semicarbazone derivatives. Structure-activity relationships. Eur. J. Med. Chem. 35 (2000) 343-350.

Fecha	MA-SGC-2-3.35	V.01
2013/12/30	Página 3 de 5	

[7] A.O.M. Stoppani , S. Goijman, M. Dubin , S.H. Fernández Villamil , M.P. Molina Portela, A.M. Biscardi, M. Paulino Trends in comparaty Biochem. And Physiol. (2000), 7, 1-16. Cytotoxicity of lipophilic o-naphthoquinones:: Structure-activity relationships.,

[8] Iribarne, F.; Paulino, M.; Aguilera, S.; Murphy, M.; Tapia, O. Docking and molecular dynamics studies at trypanothione reductase and glutathione reductase binding sites. J. Mol. Model., 2002, 8(5), 173.

[9] Paulino, M., Iribarne, F., Hansz, M., Hikichi, N., Vega, M., Seoane, G., Cerecetto, H., Di Maio, R., Caracelli, I., Zukerman-Schpector, J., Olea, C., Stoppani, A.O.M., Berriman, M., Fairlamb, A.H. and Tapia, O. Computer assisted design of potentially active anti-trypanosomal compounds. J. Mol. Struct. (TEOCHEM), 2002, 584, 95-105.

[10] M. Paulino, F. Iribarne, M. Dubin, S. Aguilera-Morales, O. Tapia and A. O.M. Stoppani. The chemotherapy of Chaga´s disease: An overview. Mini-Reviews in Medicinal Chemistry, 5, 2005, 499-519.

[11] CARRARO, R. ; BÚA, J. ; RUIZ, A.; PAULINO, M. Modelling and study of cyclosporin A and related compounds complexes with a Trypanosoma cruzi cyclophilin. Journal of molecular graphics & modelling, v. 26 , p. 48-61, 2007.

[12] PAULINO, M. IRIBARNE, F. AGUILERA, S.; TAPIA, O.; Interaction energies of nitrofurans with trypanothione reductase and glutathione reductase studied by molecular docking. Journal of Molecular Structure Theochem, v. 818 , p. 7-22, 2007

[13] PAULINO, M. ALVAREDA, E.M.; DENIS, P. A. ; BARREIRO, E. J.; SPERANDIO DA SILVA, G. M. ; DUBIN, M. ; GASTELLÚ, C. ; AGUILERA, S.; TAPIA, O. Studies of Tripanocidal (Inhibitory) Power of Naphthoquinones: Evaluation of Quantum Chemical Molecular Descriptors for Structure-activity Relationships. European Journal of Medical Chemistry, v. , p. -, 2008

Modalidad del Curso:

	Teórico	Practico	Laboratorio	Otros (*)
--	---------	----------	-------------	-----------

Asistencia Obligatoria	Sí	Sí		
Modalidad Flexible (carga horaria mínima)	No	No	Sí	Si

(*) Talleres seminarios y/o pasantías supervisadas, según el caso de aplicación que desarrolle el estudiante en su trabajo de Taller Integrador

Régimen de ganancia:

El estudiante debe asistir a por lo menos el 80% de la clases del curso, tanto teóricos, teórico-prácticos como las horas destinadas al proyecto integrador.

Las evaluaciones consistirán en un parcial escrito sobre los contenidos teóricos del curso que aportará el 40% de la ganancia y una presentación escrita y defensa sobre el proyecto integrador realizado, que aportará el restante 60%. El estudiante que obtenga, entre ambas evaluaciones, al menos 60% del puntaje, exonerará el curso, de lo contrario, deberá dar examen.

Por mayor información visitar la página del curso o consultar directamente en la página web de la asignatura, instalada en la plataforma moodle de cursos de la Facultad de Química