



- Bioinformática II - Estructural

Carácter del curso	ELECTIVO
Semestre en que se dicta	PAR
Número de créditos	11
Carga horaria semanal (hs)	Clases teóricas: 3 hs (Primer hemisemestre) Clases teórico-prácticas: 3 hs Clases prácticas: 3 hs
Previaturas	NO TIENE
Cupo	15

Estructura Responsable:

Área Bioinformática-DETEMA, Facultad de Química, UdelaR.

Docente Responsable:

Margot Paulino

Federico Iribarne

Docentes colaboradores

Jorge Cantero

Andrés Camilo Ballesteros

Nathalia Aceval

Sergio Pantano

Objetivos generales:

- Capacitar al alumno para que desarrolle competencias y habilidades que le permitan estudiar estructura y propiedades de biomoléculas claves asociadas a problemas biológicos, bioquímicos y/o farmacocquímicos y/o de química medicinal y/o biomédica. Se entrenará al estudiante en la aplicación de nuevos métodos y recursos bioinformáticos de modelado biomolecular de proteínas y ácidos nucleicos, predicción de características funcionales de tales biomoléculas, predicción de propiedades fisicoquímicas de moléculas orgánicas que sean ligandos o sustratos de tales biomoléculas y posterior análisis de correlación estructura-actividad.

Fecha	MA-SGC-2-3	V.01
Res.91 CFQ 25/09/2025	Página 1 de 10	



Bioinformática II - Estructural

Objetivos específicos:

- Reconocer la importancia de la bioinformática estructural en el proceso del descubrimiento de nuevos fármacos.
- Conocer los sistemas biológicos y bioquímicos relevantes asociados a las diferentes patologías.
- Conocer los mecanismos de acción asociados a una serie de patologías citadas como ejemplos de aplicación en el curso.
- Conocer las estructuras tridimensionales de las biomoléculas claves en los mecanismos de acción estudiados.
- Conocer las estructuras tridimensionales de las moléculas que puedan actuar como ligandos o sustratos de tales biomoléculas.
- Adquirir conocimientos sobre los métodos computacionales que permiten desplegar y visualizar las estructuras tridimensionales en estudio.
- Adquirir conocimientos sobre los métodos computacionales que permiten modelar nuevas biomoléculas.
- Adquirir conocimientos sobre los métodos que permiten estudiar la forma de unión de las diferentes estructuras en estudio y la energía asociada a dicha unión (Docking molecular)
- Adquirir conocimientos a través de la consulta de libros y artículos relacionados con el tema.

Contenidos:

TEÓRICO

1) Introducción a la Mecánica Molecular

Introducción a los conceptos de la Mecánica Molecular (MM). Ecuaciones y parámetros de los Campos de Fuerza. Tipos de campos de fuerza. Componentes enlazantes: enlaces, ángulos, torsionales. Componentes no enlazantes: electrostáticos y van der Waals. Campos de fuerza para pequeñas moléculas. Campo de fuerzas para biomoléculas. Gromos, Amber, Charmm.

2) Minimización de Energía

Conceptos de estabilidad de la geometría molecular. Optimización de la estructura mediante minimización de la energía. Algoritmos y estrategias de exploración de la Superficie de la Energía Potencial: orden cero (simplex), primer orden (descenso más pronunciado y gradientes conjugados) y segundo orden (Newton-Raphson y cuasi-newtonianos).

Fecha	MA-SGC-2-3	V.01
Res.91 CFQ 25/09/2025	Página 2 de 10	



Bioinformática II - Estructural

3) Análisis Conformacional

Espacio conformacional de pequeñas moléculas. Ángulos planos y torsionales. Evaluación energética de las conformaciones. Métodos de búsqueda de conformaciones: métodos sistemáticos, métodos aleatorios, construcción de modelos, algoritmos genéticos. Perfiles de energía conformacional.

4) Anclaje molecular (Docking)

Conceptos básicos de diseño racional de drogas. LBDD y SBDD. Concepto de docking y unión Ligando-Receptor. Funciones de Score. Aproximación a la energía libre de unión. Métodos de exploración y anclaje molecular : DOCK, AUTODOCK, GLIDE, MOE. Métodos de selección y optimización de bases de datos de anclaje molecular.

5) Dinámica Molecular

Métodos de simulación. Dinámica molecular con potenciales continuos. Ecuaciones básicas de dinámica molecular. Segunda Ley de Newton. Algoritmos (Verlet, Beeman, Gear, Shake). El ensamble microcanónico. Dinámica Molecular a temperatura/presión constante. Dinámica estocástica. El potencial de fuerza media. Efecto del solvente. La ecuación de Langevin. Dinámica browniana Tratamiento de bordes en las simulaciones. Tratamiento de las interacciones de largo alcance. Análisis de resultados de una simulación: Energía y Estructura.

TEÓRICO-PRÁCTICO

1) Generación de modelos moleculares

MOE window. Builder. Atom manager. Medidas de ángulos, distancias y diedros. Selección del campo de fuerzas. Asignación de hidrógenos. Refinamiento de estructuras.

2) Análisis conformacional e Interacciones Receptor – Ligando

Base de datos PDB. Análisis de modelos cristalográficos. PDBsum. Manipulación de macromoléculas en MOE. Asignación de hidrógenos y selección del campo de fuerzas. Estados de protonación de aminoácidos. Manipulación y corrección de modelos cristalográficos. Análisis de interacción Ligando – Receptor. 2D Ligand Interaction.

3) Búsqueda de Sitios de Unión – Site Finder

Site Finder: búsqueda de sitios posibles de unión. Métodos de búsqueda, Selección y aplicación de Farmacóforos de ligando y sitio. Caracterización del sitio de unión.

4) Generación de modelos biomoleculares

Búsqueda de estructuras blanco. Búsqueda de estructuras molde. Alineamiento y selección del mejor modelo.

5) Generación de modelos biomoleculares por homología

Reemplazo molecular y refinamiento por minimización de Energía.

Fecha	MA-SGC-2-3	V.01
Res.91 CFQ 25/09/2025	Página 3 de 10	



Bioinformática II - Estructural

6) Generación de modelos biomoleculares por métodos de “threading”

Entrenamiento en el uso de I Tasser y de Phyre.

7) Generación de modelos biomoleculares por métodos ab Initio e inteligencia artificial

Entrenamiento en el uso de Robetta y AlphaFold.

8) Generación de modelos biomoleculares a través de la identificación de dominios y análisis y selección

Entrenamiento en el uso de ASSIST y LIBRA.

9) Preparación de modelos biomoleculares para simulaciones de Dinámica Molecular

Generación del modelo solvatado y con iones. Regularización por minimización de Energía. Dinámica Molecular. Etapas: Calentamiento, equilibramiento y muestreo.

10) Análisis de Trayectorias de Dinámica Molecular

Magnitudes, esquemas y gráficos de análisis de una simulación de Dinámica Molecular. Evaluación del equilibrio energético y estructural. Energía de interacciones ligando-receptor.

PRÁCTICO

En las clases prácticas, los estudiantes desarrollarán una aplicación en un tema de interés, utilizando las estrategias impartidas durante las clases teóricas y las clases teórico-prácticas. Estas actividades se desarrollarán bajo la supervisión de docentes y estudiantes de posgrado del área Bioinformática. El software a utilizar durante las clases prácticas incluye MOE, NAMD, VMD, AUTODOCK-VINA, ALPHAFOLD, ITASSER, ROBETTA, etc.

Bibliografía:

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. Howarth J, Lloyd DG. Redox systems as conduits for antimalarial compounds Journal of Antimicrobial Chemotherapy 2001 47: 122-124
3. 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 antitrypanosomal 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	V.01
Res.91 CFQ 25/09/2025	Página 4 de 10	

4. 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.,
5. 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.
6. 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.
7. 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.
8. 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.
9. 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
10. 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
11. Structural Bioinformatics (Methods of Biochemical Analysis). 2009. Jenny Gu, Philip E. Bourne
12. Free Energy Calculations: Theory and Applications in Chemistry and Biology (Springer Series in Chemical Physics). 2007. Christophe Chipot (Editor), Andrew Pohorille (Editor)
13. Alvareda, E., Iribarne, F., Espinosa, V., Miranda, P., Santi, D., Aguilera, S., Bustos, S. and Paulino Zunini, M.P. (2019) In Silico and in Vitro Approach for the Understanding of the Xanthine Oxidase Inhibitory Activity of Uruguayan Tannat Grape Pomace and Propolis Poliphenols. Journal of Biophysical Chemistry, 10, 1-14. <https://doi.org/10.4236/jbpc.2019.101001>
14. M.D. Santi, M. Paulino Zunini, B. Vera, C. Bouzidi, V. Dumontet, A. Abin-Carriquiry, R. Grougnet, M.G. Ortega. Xanthine oxidase inhibitory activity of natural and hemisynthetic flavonoids from Gardenia oudiepe (rubiaceae) in vitro and molecular docking studies. Eur J Med Chem. 2018 Jan 1;143:577-582. doi: 10.1016/j.ejmech.2017.11.071
15. Unveiling the Architecture of Human Fibrinogen: A Full-Length Structural Model (Completo, 2025) Medeiros Romina , Cantero, J , BORTHAGARAY, G , M. PAULINO ChemBioChem, v.: 26 8 , p.:1 - 15, 2025
16. Re-styling an old scaffold: ebsulfur analogs with improved activity and selectivity against the infective stage of trypanosomes (Completo, 2025) CRISTINA QUIROGA , MARCELO

Fecha	MA-SGC-2-3	V.01
Res.91 CFQ 25/09/2025	Página 5 de 10	

- INCERTI , DIEGO BENÍTEZ , MARTIN LUZARDO , EDUARDO MANTA , ALEJANDRO LEYVA , MARGOT PAULINO , MARCELO A. COMINI , ANDREA MEDEIROS *European Journal of Medicinal Chemistry*, p.:117675 2025
17. Chromene flavanones from *Dalea boliviana* as xanthine oxidase inhibitors: in vitro biological evaluation and molecular docking studies (Completo, 2025) E. BEDOYA , Maria Daniela Santi, M.Daniela Santi, Maria D. Santi, M.D. Santi, M.F. NEGRO , J. ECHEVERRIA , M. PAULINO , M.A. PERALTA , M.G. ORTEGA *Frontiers in Pharmacology*, 2025
 18. Pouring SIRAH on NAMD (Completo, 2024) J. CANTERO , AC. BALLESTEROS , L. SANTOS , M. PAULINO , S. PANTANO *Journal of Physical Chemistry B*, 2024 Palabras clave: SYRAH Coarse grain NAMD <https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.jpcc.4c03278>
 19. New Smoothened ligands based on the purine scaffold as potential agents for treating pancreatic cancer (Completo, 2024) C ESPINOSA , J BERTRAND , A. VILLEGAS-MENARES , S. GUERRERO , L. DI MARCOTULLIO , SH. NAVACCI , G. SCHULTE , P. KOZIELEWICZ , N. BLOCH , V. VILLELA , M. PAULINO , M. KOGAN , J. CANTERO , C.O. SALAS *Bioorganic Chemistry*, v.: 151 p.:10768 DOI: <https://doi.org/10.1016/j.bioorg.2024.107681>
 20. Antifungal and Antiparasitic Activity of Novel Metallocene-containing Fluconazole Derivatives (Completo, 2024) L Yan , G. Scalese , C. Bulman , R. Vinck , O. Blacque , M. PAULINO , A. Ballesteros-Gasallas , L. Pérez Díaz , G. Salinas , M. Mitreva , T. Weil , K. Cariou , J. Sakanari , D. Gambino , G. Gasser *ACS Infectious Diseases*, 2024 DOI: <http://dx.doi.org/10.26434/chemrxiv-2023-cp31b>
 21. Prenylated flavonoids from *Dalea* genus as xanthine oxidase inhibitors: In vitro bioactivity evaluation and molecular docking studies (Completo, 2023) M.D. SANTI , E. BEDOYA AGUIRRE , M.F. NEGRO , M. PAULINO ZUNINI , M.A. PERALTA , M.G. ORTEGA *Results in Chemistry*, v.: 6 p.:101115 2023 DOI: [10.1016/j.rechem.2023.101115](https://doi.org/10.1016/j.rechem.2023.101115)
 22. Identification of potential biological target for trypanocidal sesquiterpene lactones derivatives (Completo, 2023) T ADESSI , J CANTERO , AC BALLESTEROS , ME GARCÍA , V NICOTRA , M. PAULINO *Journal of Biomolecular Structure and Dynamics*, v.: 1 p.:1 - 14, DOI: <https://doi.org/10.1080/07391102.2023>.
 23. Mode of action of p-quinone derivatives with trypanocidal activity studied by experimental and in silico models (Completo, 2023) Trabajo relevante ANDRES BALLESTEROS-CASALLAS , CRISTINA QUIROGA , CECILIA ORTIZ , DIEGO BENÍTEZ , PABLO A. DENIS , DAVID FIGUEROA , CRISTIAN O. SALAS , JEANLUC BERTRAND , RICARDO A. TAPIA , PATRICIO SÁNCHEZ , GIAN PIETRO MISCIONE , MARCELO A. COMINI , MARGOT PAULINO *European Journal of Medicinal Chemistry*, v.: 246 p.:114926 2023 DOI: [10.1016/j.ejmech.2022.114926](https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2022.114926)
 24. Identification of tyrosine nitration as a nitroxidative postranslational modification in fibrinogen (Completo, 2023) ROMINA MEDEIROS FIGUEREDO , ELIZABETH LÓPEZ-ACHIGAR , JORGE CANTERO PIÑANEZ , MARGOT PAULINO ZUNINI , ESPERANZA MORATO LÓPEZ , CARLOS GARCÍA GARCÍA , ANTONIO MARTINEZ RUIZ *Free Radical Biology and*

Fecha	MA-SGC-2-3	V.01
Res.91 CFQ 25/09/2025	Página 6 de 10	

- Medicine, v.: 201 p.:63 - 64, 2023
DOI: 10.1016/j.freeradbiomed.2023.03.258
25. Antioxidant Capacity and NF- κ B-Mediated Anti-inflammatory Activity of Six Red Uruguayan Grape Pomaces E. FARIÑA , H. DAGHERO , M. BOLLATI-FOGOLIN , J. CANTERO , E. BOIDO , M. MONCADA BASUALTO , F. POLITICELLI , M. PAULINO *Molecules*, v.: 28 2023
DOI: <https://doi.org/10.3390/xxxxx>
26. Platinum and Palladium Compounds: Disrupting the Ergosterol Pathway in *Trypanosoma cruzi* (Completo, 2023) F. MOSQUILLO , G SCALESE , R MOREIRA , P. DENIS , I. MACHADO , M. PAULINO , D GAMBINO , L PÉREZ *ChemBioChem*, 2023
DOI: <https://doi.org/10.1002/cbic.202300406>
27. Structure-Based Bioisosterism Design, Synthesis, Biological Evaluation and In Silico Studies of Benzamide Analogs as Potential Anthelmintics (Completo, 2022) F. VAIOLETTI , M. PAULINO , G. MAHLER , SALINAS G , CECILIA SAIZ *Molecules*, v.: 27 p.:2659 - 2678, 2022
28. Modelling of the Citrus CCD4 family members: in silico analysis of membrane binding and substrate preference (Completo, 2022) J. CANTERO , F. POLITICELLI , M. PAULINO *International Journal of Molecular Sciences*, 2022
29. Characterization of the B-cell epitopes of *Echinococcus granulosus* histones H4 and H2A recognized by sera from patients with liver cysts (Completo, 2022) M. MAGLIOCO , F. AGÜERO , MP. VALACCO , A JUAREZ VALDEZ , M. PAULINO , AG FUCHS *Frontiers in Cellular and Infection Microbiology*, 2022
30. Modeling, molecular dynamics and docking studies of a full-length *Echinococcus granulosus* 2DBD nuclear receptor (Completo, 2022) SAIRA CANCELA , ADRIANA ESTEVES , GABRIELA ALVITE , MARGOT PAULINO *Journal of Biomolecular Structure and Dynamics*, p.:1 - 10, 2022
DOI: 10.1080/07391102.2021.2023641
31. Development of 3D-QSAR and pharmacophoric models to design new anti-*Trypanosoma cruzi* agents based on 2-aryloxynaphthoquinone scaffold (Completo, 2022) M. PAULINO , C. ESPINOSA-BUSTOS , J. BERTRAND , D. CABEZAS , J. MELLA , B. DAVILA , H. CERECETTO , A. BALLESTEROS-GASALLA , C.O. SALAS SAR and QSAR in Environmental Research, v.: 33 9 , p.:701 - 728, 2022
DOI: 10.1080/1062936X.2022.2120069
32. Peptides derived from the gastrointestinal digestion of amaranth 11S globulin: structure and antioxidant functionality (Completo, 2021) S. GARCIA FILLERIA , A. NARDO , M. PAULINO , V. TIRON *Food Chemistry Molecular Sciences*, 2021
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.fochms.2021.100053>
33. Synthesis of 2, 7-diarylpyrazolo [1, 5-a] pyrimidine derivatives with antitumor activity. Theoretical identification of targets (Completo, 2021) Ballesteros-Casallas Andres , M. PAULINO , P VIDOSSICH , C MELO , E JIMÉNEZ , JC CASTILLO , J PORTILLO , GP MISCIONE *International Journal of Molecular Sciences*, v.: 22 24 , p.:13616 2021
34. Expanding the chemical space of aryloxy-naphthoquinones as potential anti-Chagasic

- agents: synthesis and trypanosomicidal activity. NOHEMÍ A. BECERRA , CHRISTIAN ESPINOSA-BUSTOS , KARINA VÁZQUEZ , GILDARDO RIVERA , MARGOT PAULINO , JORGE CANTERO , BENJAMÍN NOGUEDA , FABIOLA CHACÓN VARGAS , UZIEL CASTILLO-VELAZQUEZ , ANA F. ELIZONDO RODRÍGUEZ , SOFÍA TOLEDO , ADRIANA MORENO-RODRÍGUEZ , MARIO ARANDA , CRISTIAN O. SALAS Medicinal Chemistry Research, 2021
DOI: 10.1007/s00044-021-02809-3
35. Convergent synthesis, drug target prediction, and docking studies of new 2,6,9-trisubstituted purine derivatives (Completo, 2021) A. Villegas , R. Satheeshkumar , A. Ballesteros-Casallas , M. PAULINO , A. Castro , Ch. Espinosa Bustos , C. SALAS Journal of Heterocyclic Chemistry, p.:1 - 15, 2021
DOI: 10.1002/jhet.4368
36. Identification of pyrazolotriazinones as potential agents for hyperuricemia treatment by using in vitro and in silico studies (Completo, 2020) ML Sciú , MD Santi , J Cantero , JP Colomer , M. PAULINO , MG Ortega , EL Moyano SN Applied Sciences, v.: 143 p.:577 - 582, 2020
DOI: 10.1007/s42452-020-2756-60
37. New mechanistic insights into the reversible aldol reaction catalysed by Rhamnulose-1-phosphate aldolase from Escherichia coli (Completo, 2020) A. Rigual , J. Cantero , M. Risso , P. Rodriguez , RODRÍGUEZ, S. , M. PAULINO , GAMENARA. D , VEIGA ,N. Molecular Catalysis, v.: 495 p.:111 - 131, 2020
DOI: 10.1016/j.mcat.2020.111131
38. Approach to analyze Rotavirus Transport Mechanism in Porous Media by Molecular Modelling and Molecular Dynamics methods. Albany 2019 Conversation 20 June 11-15 2019 Adenine Press (2019) E. ALVAREDA , J. CANTERO , F LOPEZ TORT , M VICTORIA , M. PAULINO , R COLINA , P GAMAZO Journal of Biomolecular Structure and Dynamics,
39. Bioinformatic analysis of a novel Echinococcus granulosus nuclear receptor with two DNA binding domains. G. ALVITE , X. RIERA , S. CANCELA , M. PAULINO ZUNINI , ESTEVES, A PLoS ONE, p.:1 - 16, 2019
DOI: <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0224703>
40. New aryloxy-quinone derivatives with promising activity on Trypanosoma cruzi (Completo, 2019) CH. ESPINOSA , K. VAZQUEZ , J. VARELA , CERECETTO, H. , M. PAULINO ZUNINI , R. SEGURA , B. VERA , J. PIZARRO , GONZALEZ, M. , AM. ZARATE , C. SALAS. Archiv der Pharmazie, v.: 353 1 , p.:1 - 11, 2019
DOI: 10.1002/ardp.201900213
41. In Silico and in Vitro Approach for the Understanding of the Xanthine Oxidase Inhibitory Activity of Uruguayan Tannat Grape Pomace and Propolis Poliphenols. Elena Alvareda Migliaro , Federico Iribarne , Victoria Espinosa , Pablo Miranda , Maria Daniela santi , Sara Aguilera , Sandra Bustos , M. PAULINO ZUNINI Journal of Biophysical Chemistry, v.: 10 1 , p.:1 - 14, 2019
DOI: 10.4236/jbpc.2019.101001

Fecha	MA-SGC-2-3	V.01
Res.91 CFQ 25/09/2025	Página 8 de 10	

42. An in silico study of the citrus dioxygenases CCD4 family substrates. Trabajo relevante Mauricio Vega Tejjido , Jorge Cantero , Maria Jesus Rodriguez , Carolina López , M. PAULINO ZUNINI Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, v.: 5 p.:1 - 12, 2018
DOI: 10.1080/07391102.2018.1477619
43. Xanthine oxidase inhibitory activity of natural and hemisynthetic flavonoids from Gardenia oudiepe (rubiaceae) in vitro and molecular docking studies . MD SANTI , M. PAULINO ZUNINI , B VERA , C Bousidi , V Dumontet , A Abin-Carriquiry , R Grougnet , MG Ortega. Chimie Thérapeutique, v.: 143 p.:577 - 582, 2018
44. Structural Analysis and Molecular Docking of Trypanocidal Aryloxy-quinones in Trypanothione and Glutathione Reductases: A Comparison with Biochemical Data (Completo, 2017) B VERA , K. VAZQUEZ , C. MASCAYANO , R. TAPIA , V. ESPINOSA , J SOTO-DELGADO , C.O. SALAS , M. PAULINO ZUNINI Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, 35 8, p.:1785 - 1803, 2017
DOI: 10.1080/07391102.2016.1195283
45. Trypanothione Reductase: A Target for the Development of Anti-Trypanosoma cruzi drugs (Completo, 2017) K. VAZQUEZ , M. PAULINO ZUNINI , C.O. SALAS , ZÁRATE JJ , B VERA , RIVERA G Mini-Reviews in Medicinal Chemistry, v.: 17
DOI: 10.2174/1389557517666170315145410
46. Structural evidence of quercetin multi-target bioactivity: a reverse virtual screening strategy (Completo, 2017) Trabajo relevante D CARVALHO , M. PAULINO ZUNINI , POLTICELLI F , WILLIAMS R , ABIN JA European Journal of Pharmaceutical Sciences, v.: 106 p.:393 - 403,
DOI: 10.1016/j.ejps.2017.06.028
47. Combined Molecular Modelling and 3D-QSAR Study for Understanding the Inhibition of NQO1 by Heterocyclic Quinone Derivatives (Completo, 2017) LÓPEZ C , ALZATE J , M. PAULINO ZUNINI , MELLA J , C.O. SALAS , R. TAPIA , J SOTO Chemical Biology & Drug Design, v.: 91 1 , p.:29 - 38, 2017
DOI: 10.1111/cbdd.13051 B

Modalidad del Curso

	Teórico	Práctico	Teórico-práctico	Otros(*)
Asistencia Obligatoria	No	Sí	No	
Modalidad Flexible (carga)	Sí**	No	Sí**	



836 – Bioinformática II - Estructural

horaria mínima)				
--------------------	--	--	--	--

(*) Especificar (talleres, seminarios, visitas, tareas de campo, pasantías supervisadas, etc.)

**Las clases teóricas y teórico-prácticas también se ofrecerán en modalidad virtual a través de la plataforma de Zoom. Las clases prácticas y los parciales deben realizarse de manera presencial.

Régimen de ganancia:

El curso se evaluará mediante dos pruebas parciales. La primera prueba parcial será escrita y se evaluará el contenido teórico del curso (Puntaje: 25 puntos). La segunda prueba parcial será una presentación oral y se evaluarán los resultados obtenidos en el curso práctico (Puntaje 35 puntos). Puntaje total: 60 puntos

De acuerdo al resultado global obtenido en los dos parciales y la asistencia a clases, el estudiante obtendrá el estado de:

-Aprobado (entre 18 y 29 puntos)

-Exonerado (30 o más puntos)

-A examen (menos de 18 puntos)

-Perdido (asistencia a las clases prácticas no alcanza el 80% del total)

Por mayor información visitar la página del curso o consultar directamente con los docentes responsables: margot@fg.edu.uy y fede@fg.edu.uy.

Fecha	MA-SGC-2-3	V.01
Res.91 CFQ 25/09/2025	Página 10 de 10	