



Diseño de Compuestos Bioactivos

Carácter del curso	ELECTIVO
Semestre en que se dicta	IMPAR
Número de créditos	9
Carga horaria semanal (hs)	Clases teóricas: 3 hrs (Primeras 6 semanas) Clases teórico-prácticas: 2 hrs Clases prácticas: 3 hrs
Previaturas	NO TIENE
Cupo	20

Estructura Responsable:

Área Bioinformática-DETEMA, Facultad de Química, UdelaR

Docentes Responsables:

Margot Paulino
Federico Iribarne

Docentes colaboradores

Sergio Pantano
Jorge Cantero
Andrés Camilo Ballesteros
Ricardo Faccio

Objetivos generales:

- Capacitar al estudiante para que desarrolle competencias y habilidades que le permitan estudiar y conocer los principios básicos de la farmoquímica molecular dirigida al diseño de nuevas moléculas con actividades biológicas interesantes.
- Desarrollar sus conocimientos básicos en estos tópicos
- Capacitar al estudiante para que desarrolle – a través de talleres de aplicación - competencias y habilidades que le permitan describir las propiedades fisicoquímicas (electrónicas, hidrofóbicas, estéricas) asociadas a la estructura que definen tales actividades.

Objetivos específicos:

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

Fecha	MA-SGC-2-3	Y.01
Res. 91 CFQ 25/09/2025	Página 1 de 11	



Diseño de Compuestos Bioactivos

- 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.
- 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
- Aplicar protocolos de trabajo para la producción de nuevas estructuras. Screening virtual y creación de bases de datos de moléculas.
- Adquirir conocimientos sobre modelado molecular y cálculo de descriptores de las propiedades fisicoquímicas asociadas a la actividad biológica.
- Adquirir conocimientos sobre los métodos de estudio de la correlación estructura- actividad: PCA, PCR, PLS, QSAR, QSAR-3D (CoMFA/CoMSIA)
- Adquirir conocimientos sobre cómo poder predecir nuevos blancos de acción (biomoléculas) y estudiar su vinculación con moléculas diseñadas para que al interactuar con ellas, desencadenen actividades biológicas deseadas.
- Incentivar el estudio de artículos relacionados con el tema.

Contenido

TEÓRICO

1) INTRODUCCIÓN AL DISEÑO DE COMPUESTOS BIOACTIVOS

Desarrollo de fármacos. Diseño tradicional y diseño racional de drogas/ligandos. Importancia de la Bionformática y el Modelado Molecular. Diseño de drogas basado en el ligando (LBDD) y Diseño de drogas basado en la estructura (SBDD).

2) CAMPOS DE FUERZA

Introducción a los conceptos de la Mecánica Molecular (MM). Ecuaciones y parámetros de los Campos de Fuerza. Interacciones enlazantes y no enlazantes: bond stretching, angle bending, ángulos torsionales, interacciones de van der Waals y electrostáticas. Ecuaciones del movimiento molecular.

3) MINIMIZACIÓN DE ENERGÍA

Concepto de estabilidad de la geometría molecular. Optimización de la estructura mediante minimización de la energía. Algoritmos de primer orden (gradientes conjugados y descenso más pronunciado) y de segundo orden (Newton-Raphson, métodos cuasi-newtonianos). Estrategias de exploración de la superficie de Energía Potencial.

Fecha	MA-SGC-2-3	V.01
Res. 91 CFQ 25/09/2025	Página 2 de 11	



Diseño de Compuestos Bioactivos

4) MEDIDAS DE ACTIVIDAD BIOLÓGICA. CONCEPTO DE ESPECIFICIDAD

Descripción de las características que se espera encontrar en un droga específica de un receptor macromolecular, así como las características del reconocimiento e interacciones en los complejos moleculares formados por un ligando y su receptor (L-R). Termodinámica y cinética de la formación de los complejos L-R.

5) FARMACÓFORO Y ESQUEMAS FARMACOFÓRICOS

Definición. Farmacóforos 2D y farmacóforos 3D. Búsqueda de farmacóforos. Selección del mejor farmacóforo.

6) **TAMIZAJE VIRTUAL de PEQUEÑAS MOLÉCULAS.** Uso de datos de estructura tridimensional y código SMILES. Almacenamiento en bases de datos estructurales. Búsqueda utilizando el código SMILES en grandes bibliotecas de moléculas (PDB, PubChem y ZINC). Filtrado a partir de las mismas utilizando farmacóforos y otras propiedades y características químicas y biológicas.

7) MODELOS QSAR

Noción de relaciones cuantitativas entre estructura y actividad. Actividad biológica in vivo e in vitro. Descriptores moleculares (electrónicos, estéricos, hidrofóbicos). Antecedentes: ecuación de Hansch. Ecuación QSAR general. Etapas en la generación del modelo QSAR. Uso del modelo QSAR. Interpolación y extrapolación.

8) HUELLAS DACTILARES

Definición de huella dactilar (FP) basada en características estructurales asociadas a la actividad biológica de las moléculas en vías de diseño. Desarrollo de metodología y protocolo para generar modelos QSAR utilizando los FP como descriptores. Criterio de ranqueo (scoring) para determinar cuan similares son los FP de una nueva molécula respecto al set original.

9) ALGORITMOS GENÉTICOS

Concepto. Aplicación de la genética evolutiva a la generación y optimización de estructuras. Búsqueda global. Operadores: mutación, replicación y entrecruzamiento. Algoritmos. La energía interna como medida de fitness.

10) MODELOS QSAR 3D

Definición. Ventajas con respecto a los modelos 2D. Superficies de van der Waals y electrostáticas. Método CoMFA/CoMSIA.

11) ANCLAJE MOLECULAR

Conceptos básicos de la unión ligando-receptor. Funciones de score. Algoritmos de anclaje: Dock, AutoDock, Glide, Moe y Gold. Métodos de selección y optimización de bases de datos de anclaje molecular.

Fecha	MA-SGC-2-3	V.01
Res. 91 CFQ 25/09/2025	Página 3 de 11	



Diseño de Compuestos Bioactivos

TEÓRICO-PRÁCTICO

- 1. INTRODUCCIÓN AL PAQUETE DE SIMULACIÓN MOE**
Introducción al manejo de MOE, introducción a interfaz gráfica, comandos iniciales y visualización.
- 2. ANÁLISIS CONFORMACIONAL**
Elaboración de un mapa conformacional utilizando los métodos disponibles en MOE: LowModelMD, estocástico y sistemático.
- 3. CONSTRUCCIÓN DE BASE DE DATOS**
Construcción, manipulación y curado de bases de datos en MOE. Uso del Visor de Base de Datos de MOE .
- 4. CÁLCULO DE DESCRIPTORES**
Introducción al concepto de descriptor fisicoquímico, estudio de los diferentes tipos de descriptores en MOE (2D y 3D) y cálculo, curado (análisis de contingencia, PCA y clustering) y uso de estos en bases de datos.
- 5. OBTENCIÓN DE FARMACÓFOROS**
Introducción al concepto de modelo farmacéutico, revisión del módulo *query editor* y elucidación de farmacofóro, construcción de modelos consenso y construcción de modelos basados en la interacción ligando-receptor.
- 6. RELACIONES ESTRUCTURA ACTIVIDAD (SAR)**
Elaboración de un análisis de relación estructura actividad usando 1. El SARreport de MOE y MOESAIC de moeweb.
- 7. CONSTRUCCIÓN DE HUELLAS DACTILARES (FP)**
Introducción a los Finger Prints (FP), revisión de diferentes esquemas de FP ofrecidos por MOE, construcción de FP en una base de datos de ligandos.
- 8. CONSTRUCCIÓN DE MODELOS QSAR MULTIVARIANTES**
Construcción de modelos QSAR 2D usando: 1. QuaSAR directamente en MOE, con los métodos de PLS (Mínimos cuadrados parciales) y PCR (Análisis de componentes principales) y 2. Extensión de SVL Exchange *AutoQSAR & QSAR-Evolution*, lo cual permite utilizar algoritmos genéticos para la construcción de los modelos.
- 9. GENERACIÓN DE MODELOS QSAR 3D**
Construcción de modelos QSAR 3D con MOE y Open3D-QSAR. Comparación con los modelos 2D e interpretación de los resultados.
- 10. TAMIZAJE REVERSO**
Búsqueda computacional de blancos usando los servidores Chemmapper y Pharmmapper. Filtrado de resultados y estrategias de clasificación de blancos encontrados.
- 11. ANCLAJE DIRECTO (DOCKING MOLECULAR)**
Anclaje molecular mediante MOE y Autodock Vina, en los que los anclajes se realizarán con complejos de proteína-ligando, siguiendo una metodología de ligando flexible y proteínas rígidas. En MOE también se usará anclaje de ajuste inducido.

Fecha	MA-SGC-2-3	V.01
Res. 91 CFQ 25/09/2025	Página 4 de 11	



Diseño de Compuestos Bioactivos

PRÁCTICO

En las clases prácticas, los estudiantes desarrollarán una aplicación en un tema de interés, usando las estrategias impartidas durante las clases teóricas y los talleres. Estas actividades se desarrollarán bajo la supervisión de docentes y estudiantes de posgrado del área Bioinformática. El software que se utilizará en estas clases incluye: MOE ChemComp Co., Autodock-vina, SHAFT, PHARMMAPPER, Open3D-QSAR (COMFA), etc.

Bibliografía:

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

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.
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

Fecha	MA-SGC-2-3	V.01
Res. 91 CFQ 25/09/2025	Página 5 de 11	

- 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 Polyphenols. 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 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 Medicine, v.: 201 p.:63 - 64, 2023
DOI: [10.1016/j.freeradbiomed.2023.03.258](https://doi.org/10.1016/j.freeradbiomed.2023.03.258)
 25. Antioxidant Capacity and NF-kB-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. POLTICELLI , 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 (Completo, 2019) 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
42. An in silico study of the citrus dioxygenases CCD4 family substrates. Trabajo relevante Mauricio Vega Teijido , 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



Diseño de Compuestos Bioactivos

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 , POLITICELLI 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	Laboratorio	Otros (*)
Asistencia Obligatoria	No	Sí		
Modalidad Flexible (carga horaria mínima)	Sí**	No	Sí**	

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

**Las clases teóricas y los talleres 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).

Fecha	MA-SGC-2-3	V.01
Res. 91 CFQ 25/09/2025		Página 10 de 11



Diseño de Compuestos Bioactivos

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@fq.edu.uy y fede@fq.edu.uy.