



## 782 - Taller en Simulaciones Biomoleculares

Carácter del curso	ELECTIVO
Semestre en que se dicta	IMPAR
Número de créditos	10
Carga horaria semanal (hs)	Clases teóricas: 4 hrs (Primeras 6 semanas) Clases teórico-prácticas: 2 hrs Clases prácticas: 3 hrs
Previaturas	NO TIENE
Cupo	15

### **Estructura Responsable:**

Área Bioinformática, DETEMA, Facultad de Química, Udelar.

### **Docentes Responsables:**

Margot Paulino  
Federico Iribarne

### **Docentes Referentes:**

Andrés Camilo Ballesteros  
Jorge Cantero  
Sergio Pantano

### **Objetivos:**

- Capacitar al alumno para que desarrolle competencias y habilidades que le permitan estudiar estructura y propiedades de biomoléculas claves asociadas a problemas biológicos, bioquímicos, farmacoquímicos, de química medicinal y/o biomédica
- Entrenar al estudiante en la aplicación de nuevos métodos y recursos bioinformáticos de modelado y simulación de proteínas y ácidos nucleicos y predicción de características funcionales de biomoléculas.
- Reconocer la importancia de la bioinformática estructural en el proceso del descubrimiento de nuevos fármacos.

### **Contenidos:**

#### **TEÓRICO**

##### **1) Simulaciones de Modelos Biomoleculares.**

Conceptos básicos. Ventajas y aplicaciones de la simulación molecular. Muestreo exhaustivo del espacio conformacional de moléculas. Tipos de simulaciones.

##### **2) Campos de fuerza**

Introducción a los conceptos de la Mecánica Molecular (MM). Ecuaciones y parámetros de los

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



## 782 - Taller en Simulaciones Biomoleculares

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

Conceptos 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.

### 4) Anclaje (Docking) Molecular

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) Simulaciones de Dinámica Molecular

Introducción. Métodos de simulación. Dinámica molecular con potenciales continuos. Ecuaciones básicas de dinámica molecular. Segunda Ley de Newton. Algoritmos de integración (Verlet, Beeman, Gear, Shake). El ensemble 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. Efecto del solvente. Tratamiento de las interacciones de largo alcance. Análisis de resultados de una simulación: Energía y Estructura.

### 6) Simulaciones de Grano Grueso (Coarse Grained)

Introducción a las ideas de grano grueso y representaciones moleculares simplificadas. Estrategias Top-down y Bottom-up y su uso en bioquímica computacional. Campos de fuerza CG. El campo de fuerzas SIRAH. Aplicaciones, ventajas y limitaciones.

### 7) Simulaciones de Dinámica Molecular de no equilibrio (Steering Molecular Dynamics)

Conceptos generales. Energía libre y coordenada de reacción. Fundamentos de la Microscopía de Fuerza Atómica (AFM). Empuje a velocidad constante o fuerza constante. Ecuación de Jarzynski. Estimadores de energía libre: Cumulativos de primer y segundo orden, estimador de Jarzynski y estimador Fluctuación-disipación. Algoritmos. Aplicaciones en sistemas biológicos.

### 8) Estimación de energía libre con el método Molecular Mechanics Poisson-Boltzmann surface area

Introducción y uso del método Molecular Mechanics Poisson-Boltzmann surface area (MM-PBSA) para la estimación de la energía libre de unión utilizando solvente implícito. Fundamentos teóricos.

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



## 782 - Taller en Simulaciones Biomoleculares

### 9) Cálculo de Energía Libre. Ciclos termodinámicos

Introducción. Energía libre. Concepto y definición. Métodos de cálculo de energías libres: Perturbación termodinámica (FEP). Integración termodinámica (TI). Energía de interacción lineal (LIE). Cálculo de diferencias de energías libres de binding. Manejo de topologías.

### 10) Simulaciones de Fuerza de Sesgo Adaptativa (Adaptative Biasing Force)

Conceptos básicos. Muestreo en paraguas (Umbrella Sampling) y ABF para el cálculo de la energía libre a lo largo de una coordenada de reacción (Potencial de Fuerza Media) Parámetros del ABF. ABF de múltiples replicas. Perfil de energía libre uni y multidimensional. ABF extendido (eABF). Estimadores de la energía libre: CZAR y el estimador Zheng/Yang. Aplicaciones a los sistemas biomoleculares.

## TEÓRICO-PRÁCTICO

### 1) Generación de bases de datos de ligandos

Modelado molecular de ligando y cálculo de propiedades

### 2) Estructura tridimensional de biomoléculas

Modelado molecular de proteínas, visualización y cálculo de propiedades

### 3) Búsqueda de Sitios de Unión – Site Finder

Site Finder: búsqueda de sitios posibles de unión

Selección y aplicación de Farmacóforos de ligando y sitio

### 4) Docking molecular

Anclaje usando metodologías y algoritmos MOE, VINA Y AUTODOCK

### 5) Minimización de energía

Optimización de la geometría molecular mediante minimización de la energía

### 6) Preparación de SIMULACIONES MOE-NAMD.

Generación del modelo solvatado y con iones. Regularización por Minimización de Energía Dinámica Molecular: Calentamiento, Equilibración y Muestreo

### 7) VMD

Introducción al programa gráfico para la visualización y modelado de estructuras. Menú en línea de comandos para la preparación de simulaciones de DM.

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



## 782 - Taller en Simulaciones Biomoleculares

### 8) QwikMD

Preparación de los archivos de entrada. Parametrización de pequeñas moléculas (ligandos y cofactores). Configuración de la simulación y selección del ensamble. Condiciones de restricción, temperatura y presión. Archivos de salida.

### 9) NAMD

Introducción al programa de simulación. Preparación de los archivos de ejecución de una simulación de Dinámica Molecular. Iniciación y acompañamiento de una simulación aplicada a un sistema biomolecular de ejemplo.

### 10) Introducción a simulaciones con el campo de fuerza SIRAH

Conversión de estructuras atómicas a modelo de Grano Grueso (CG). Simulaciones CG de Dinámica Molecular de proteínas con SIRAH. Visualización y análisis.

### 11) Análisis de Dinámica Molecular

Magnitudes, esquemas y gráficos de análisis de una simulación de MOE-NAMD y NAMD.

### 12) Dinámica Molecular de no equilibrio (Steering Molecular Dynamics)

Elección de la coordenada de reacción. Aplicación de estimadores de energía libre: estimador de Jarzynski. Aplicaciones en sistemas biológicos.

### 13) Cálculo de energía libre con MM-PBSA

Estimación de la energía libre de unión de un ligando por el método de MMPBSA a partir de una trayectoria de Dinámica Molecular.

## PRÁCTICO

En las clases prácticas, los estudiantes desarrollarán una aplicación en un tema de interés, utilizando las estrategias impartidas durante las clases teóricas y 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, 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.

<b>Fecha</b>	<b>MA-SGC-2-3</b>	<b>V.01</b>
Res. 91 CFQ, 25/09/2025	Página 4 de 10	



## 782 - Taller en Simulaciones Biomoleculares

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., Stopppani, 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 INCERTI , DIEGO BENÍTEZ , MARTIN LUZARDO , EDUARDO MANTA , ALEJANDRO LEYVA , MARGOT PAULINO , MARCELO A. COMINI , ANDREA MEDEIROS European Journal of Medicinal Chemistry, p.:117675 2025

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



## 782 - Taller en Simulaciones Biomoleculares

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
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
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
25. Antioxidant Capacity and NF-κB-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

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



## 782 - Taller en Simulaciones Biomoleculares

DOI: <https://doi.org/10.3390/xxxx>

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.

Fecha	MA-SGC-2-3	V.01
Res. 91 CFQ, 25/09/2025	Página 7 de 10	



## 782 - Taller en Simulaciones Biomoleculares

- 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

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



## 782 - Taller en Simulaciones Biomoleculares

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 (80%)	No	Sí	No	
Modalidad Flexible (carga horaria mínima)	Sí**	No	Sí**	

(\*) 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

<b>Fecha</b>	<b>MA-SGC-2-3</b>	<b>V.01</b>
Res. 91 CFQ, 25/09/2025	Página 9 de 10	



## 782 - Taller en Simulaciones Biomoleculares

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](mailto:margot@fq.edu.uy) y [fede@fq.edu.uy](mailto:fede@fq.edu.uy).

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