

# Curso de “Biología Computacional orientada al diseño de fármacos”

Cronograma tentativo:

Del 14 al 25 de noviembre de 2016 en el CELFI-Datos, FCEN – UBA.

## **Día 1 – Lunes 14 de noviembre de 2016**

9.00 a 12.30. Teórica I: Contribución de los métodos computacionales al desarrollo de nuevos fármacos. Identificación y selección de blancos

12.30 a 14.00. Almuerzo.

14.00 a 18.00. Práctica I: Identificación de blancos moleculares en *Mycobacterium tuberculosis*. Introducción al uso de TuberQ.

## **Día 2 – Martes 15 de noviembre de 2016**

9.00 a 12.30. Teórica II: Identificación y selección de blancos

12.30 a 14.00 Almuerzo.

14.00 a 18.00. Práctica II: Búsqueda e identificación de compuestos tipo droga contra un blanco molecular. Introducción al uso de LigQ.

## **Día 3 – Miércoles 16 de noviembre de 2016**

9.00 a 12.30. Teórica III - Bases de datos de ligandos tipo droga y preselección de candidatos

12.30 a 14.00. Almuerzo y posters

14.00 a 18.00. Práctica III: Introducción al Docking Molecular

## **Día 4 – Jueves 17 de noviembre de 2016**

9.00 a 12.30. Teórica IV: Docking Molecular para la obtención de complejos Proteína-ligando.

12.30 a 14.00. Almuerzo.

14.00 a 18.00. Práctica IV: Docking Molecular avanzado

## **Día 5 – Viernes 18 de noviembre de 2016**

9.00 a 12.30. Teórica V: Cribado virtual de ligandos

12.30 a 14.00. Almuerzo

14.00 a 18.00. Práctica V: Búsqueda virtual de compuestos tipo droga a gran escala. Presentación y desarrollo del proyecto especial.

**Días 6, 7 y 8 –de lunes 21 a miércoles 23 de noviembre de 2016**

Asistencia al congreso de la ISCB-LA.

**Día 9 – Jueves 24 de noviembre de 2016**

9.00 a 12.30. "Búsqueda de inhibidores de la AccD5 de *Mycobacterium tuberculosis*" - Hugo Gramajo.

12.30 a 14.00 Almuerzo.

14.00 a 15.30. "Armado de bibliotecas de compuestos por Química Combinatoria" - Javier Ramírez.

15.30 a 18.00. Desarrollo de proyecto especial

**Día 10 – Viernes 25 de noviembre de 2016**

9.00 a 12.30. Presentación de proyectos

12.30 a 14.00 Almuerzo.

14.00 a 15.00 "El rol de la bioinformática en el desarrollo de fármacos en la industria farmacéutica" – Edgardo Ferran.

15.00 a 17.00. Mesa redonda de discusión "Alcances de las técnicas computacionales para el desarrollo de fármacos".