

Curso: Biología computacional orientada al diseño de fármacos

Cronograma tentativo

Lunes 8 de mayo de 2017 – día 1:

9:00 a 12:30 hs. Teórica 1 - Contribución de los métodos computacionales al desarrollo de nuevos fármacos: Identificación y selección de blancos.

12:30 a 14:00 hs. Almuerzo

14:00hs a 18:00 hs. Práctica 1 – Identificación de blancos moleculares en Mycobacterium tuberculosis: Introducción al uso de Target Pathogens.

Martes 9 de mayo de 2017 – día 2.

9:00 a 12:30 hs. Teórica 2 - Identificación y selección de blancos

12:30 a 14:00 hs. Almuerzo

14:00hs a 18:00 hs. Práctica 2 - Búsqueda e identificación de compuestos tipo drogo contra un blanco molecular: Introducción al uso de LigQ.

Miércoles 10 de mayo de 2017– día 3.

9:00 a 12:30 hs. Teórica 3 - Bases de datos de ligandos tipo droga y preselección de candidatos.

12:30 a 14:00 hs. Almuerzo y posters

14:00hs a 18:00 hs. Práctica 3 - Introducción al Docking Molecular.

Jueves 11 mayo de 2017– día 4.

9:00 a 12:30 hs. Teórica 4 - Docking Molecular para la obtención de complejos Proteína-ligando.

12:30 a 14:00 hs. Almuerzo

14:00hs a 18:00 hs. Práctica 4 - Docking Molecular avanzado

Viernes 12 mayo de 2017 – día 5.

9:00 a 12:30 hs. Teórica 5 - Cribado virtual de ligandos.

12:30 a 14:00 hs. Almuerzo

14:00hs a 18:00 hs. Práctica 5 - Búsqueda virtual de compuestos tipo droga a gran escala. Presentación y desarrollo del proyecto especial.



En esta semana se darán charlas avanzadas de diverso tópicos novedosos en el área del descubrimiento de fármacos

Lunes 15 de mayo de 2017 – día 6

9:00 a 12:30 hs. Teórica 6 – Dr. Olson y Dr. Forli – Fragment Based Virtual Screening

12:30 a 14:00 hs. Almuerzo

14:00hs a 18:00 hs. Práctica 6 – Dinámica Molecular básica.

Martes 16 de mayo de 2017 – día 7

9:00 a 12:30 hs. Teórica 7 – Dr. Olson y Dr. Forli – Optimización de compuestos

12:30 a 14:00 hs. Almuerzo

14:00hs a 18:00 hs. Práctica 7 – Steered Molecular Dynamics - Dr. Chodera

Miércoles 17 de mayo de 2017 – día 8

8:30 a 10:30 hs. Teórica 8 – Dr. Gonzalez, Dr Chodera – Screening de compuestos en gran escala.

10:45 a 12:45 hs. Teórica 9 – Dr. Olson y Dr. Forli – Virtual High Throughput Screening

12:30 a 14:00 hs Almuerzo

14:00hs a 18:00 hs. Práctica 8 – Dr. Gonzalez, Dr Chodera - Screening de compuestos tipo droga.

Jueves 18 de mayo de 2017 – día 9

8:30 a 10:30 hs. Teórica 10 – Dr Olson y Dr. Forli – Alcances y limitaciones de protocolos actuales de Virtual Screening.

10:45 a 12:45 hs. Teórica 11 – Dr. Chodera y Dr. González- “Fragment Based Screening”.

12:30 a 14:00 hs Almuerzo

14:00hs a 18:00 hs. Práctica 9 – Trabajo de integración

Viernes 19 de mayo de 2017 – día 10.

9:00 a 12:30 hs. Mesa redonda de discusión "Alcances de las técnicas computacionales para el desarrollo de fármacos" Dr. Forli, Dr. Olson, Dr. Marti, Dr. Chodera, Dr. González

12:30 a 14:00 hs Almuerzo

14:00hs a 18:00 hs. Presentación de trabajo integrador por parte de los alumnos.