
Curso: “Biología Computacional orientada al diseño de fármacos III”

Cronograma tentativo

Día 1: Lunes 7 de mayo de 2018

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 8 de mayo de 2018 – 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 9 de mayo de 2018– 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**

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

Jueves 10 mayo de 2018– 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 11 mayo de 2018 – 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 14 de mayo de 2018 –día 6

9:00 a 12:30 hs. Teórica 6 – Dr. Barril y Dra. Cournia- Fragment Based Virtual Screening

12:30 a 14:00 hs. **Almuerzo**

14:00hs a 18:00 hs. Práctica 6 – Dr. Barril y Dra. Cournia- Dinámica Molecular básica.

Martes 15 de mayo de 2018 –día 7

9:00 a 12:30 hs. Teórica 7 –Dr. Barril: “Optimización de compuestos”

12:30 a 14:00 hs. **Almuerzo**

14:00hs a 18:00 hs. Práctica 7 – Dra. Cournia: “Optimización de compuestos”

Miércoles 16 de mayo de 2018 –día 8

9:00 a 12:30 hFs. Teórica 8 – Christoph Rademacher y Dr. Barril: “Screening de compuestos en gran escala”.

12:30 a 14:00 hs **Almuerzo**

14:00hs a 18:00 hs. Práctica 8 – Christoph Rademacher y Dra. Cournia: “*Screening* de compuestos tipo droga”.

Jueves 17 de mayo de 2018 –día 9

9:00 a 12:30 hs. Teórica 6 – Dr. Barril: “Alcances y limitaciones de protocolos actuales de Virtual Screening. Dynamic undocking”.

12:30 a 14:00 hs **Almuerzo**



14:00hs a 18:00 hs. Práctica 9 – Trabajo de integración a cargo de los Dres. Rademache, Dra. Cournia, Dr. Barril y Dr. Marti,

Viernes 18 de mayo de 2018 – día 10.

9:00 a 12:30 hs. Mesa redonda de discusión "Alcances de las técnicas computacionales para el desarrollo de fármacos" con Dres. Rademache, Cournia, Barril y Marti,

12:30 a 14:00 hs **Almuerzo**

14:00hs a 18:00 hs. Presentación de trabajo integrador por parte de los alumnos. Dres. Rademache, Dra. Cournia, Dr. Barril y Dr. Marti,