**MODELO DE CRONOGRAMA 1**

*(Nota: Contemplar un espacio libre (primer o segundo día, a definir posteriormente) para la recepción de la documentación, entrega de cheques a becarios y docentes y cobro de los mismos.)*

**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. Dr. Marcelo Martí - 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. Dr. Lucas Defelipe – 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 . Dr. Marcelo Martí y Dr. Juan Pablo Castro - Identificación y selección de blancos

12:30 a 14:00 hs. Almuerzo

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

**Miércoles 10 de mayo de 2017– día 3**.

9:00 a 12:30 hs. Teórica 3 Dr. Marcelo Martí y Dra. Luciana Capece- 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 Dr. Lucas Defelipe - Introducción al Docking Molecular.

**Jueves 11 mayo de 2017– día 4**.

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

12:30 a 14:00 hs. Almuerzo

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

**Viernes 12 mayo de 2017 – día 5.**

9:00 a 12:30 hs. Teórica 5 – Dra. Paula Cramer - Cribado virtual de ligandos.

12:30 a 14:00 hs. Almuerzo

14:00hs a 18:00 hs. Práctica 5. Dra. Valeria Levy - 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 – Optimizacion 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**

9:00 a 12:30 hs. Teórica 8 – Dr. Gonzalez, Dr Chodera – Screening de compuestos en gran escala.

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**

9:00 a 12:30 hs. Teórica 6 – Dr Olson y Dr. Forli – Alcances y limitaciones de protocolos actuales de Virtual 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.