

Planificación de la Asignatura: Diseño y Descubrim.de Drogas

Fecha: 23/10/2024 13:02

Código: L1337

Carrera: Licenciatura en Bioinformática

Departamento Académico: Biología

Docente a cargo:

Correo del docente a cargo: juan.bustamante@uner.edu.ar

Régimen de Dictado: Cuatrimestral 2º Cuatrimestre

Carga Horaria Semanal: 4 horas semanales

Carga Horaria Total: 70 horas

Contenidos Mínimos:

Avances en las técnicas y tecnologías de la investigación farmacológica, sus fundamentos y campos de aplicación.

Competencias Genéricas:

- CT 1. Identificación, formulación y resolución de problemas de la disciplina Bioinformática. Nivel de dominio 1.
- CT 4. Utilización de técnicas y herramientas de aplicación en la disciplina Bioinformática. Nivel de dominio 2.
- CS 1. Fundamentos para el desempeño en equipos de trabajo. Nivel de dominio 2.
- CS 2. Fundamentos para una comunicación efectiva. Nivel de dominio 1.
- CS 5. Fundamentos para el aprendizaje continuo y autónomo. Nivel de dominio 3.

Competencias Específicas:

- CE 2. Modelizar moléculas de interés médico para su uso en biotecnología y/o empresas involucradas en el desarrollo de fármacos. Nivel de dominio 1.

Argumentación de aportes marcados en la matriz de competencias:

1. Competencia para identificar, formular y resolver problemáticas con un enfoque molecular desde el diseño y descubrimiento de drogas, con las siguientes capacidades:
 - a. Establecer alternativas de solución a un problema presentado aplicando el pensamiento crítico;
 - b. Capacidad para formular, describir y proponer posibles soluciones a una problemática dada en base a los conceptos brindados;
 - c. Capacidad de elegir criteriosamente los componentes y enfoques de diseño y descubrimiento de drogas para un estudio molecular tanto de diseño de drogas como de análisis de reconocimientos moleculares;
 - d. Manejar gráficos e interpretar resultados, tendencias y pendientes bajo interpretaciones adecuadas de procesos de diseño de drogas y reconocimiento molecular de receptores-ligandos;
 - e. Capacidad para relacionar los temas vistos en la materia con temas de otras disciplinas y cátedras complementarias;
 - f. Capacidad para caracterizar, analizar e interpretar estructuras de complejos receptores-ligandos de acuerdo a los enfoques metodológicos abordados.
2. Competencia para utilizar de manera efectiva las técnicas y herramientas del proceso de diseño de drogas, con las siguientes capacidades:
 - a. Capacidad para dotarse de las técnicas y herramientas más comúnmente utilizadas para resolver los problemas enunciados;
 - b. Capacidad para aplicar técnicas y enfoques del proceso de diseño de drogas a distintas situaciones de

índole biofísicoquímicas, junto a la utilización de herramientas para analizar e interpretar posibles resultados en el estudio de complejos receptor-ligandos.

3. Competencia para comunicarse con efectividad, con las siguientes capacidades:

- a. Capacidad para expresarse con precisión con vocabulario específico;
- b. Capacidad de presentar, describir y explicar un complejo receptor-ligando a nivel molecular, con los distintos grados de representación, sus alcances y limitaciones;
- c. Capacidad para expresarse con claridad y precisión de manera escrita y oral;
- d. Capacidad para comunicar de forma clara y concisa los resultados de investigaciones o proyectos relacionados a colegas, especialistas y no especialistas, utilizando un lenguaje adecuado apoyado por recursos visuales.

4. Competencia para aprender en forma continua y autónoma, con las siguientes capacidades:

- a. Capacidad de investigar e interpretar novedades en el área del proceso de diseño de drogas y reconocimiento molecular;
- b. Aplicar conocimientos adquiridos en otras asignaturas en complejos biofísicoquímicos de interés;
- c. Evaluar críticamente el alcance del proceso de diseño racional de drogas en una diversidad de situaciones planteadas;
- d. Capacidad para relacionar los temas vistos integrándolos y utilizándolos como herramienta continua en la aplicación de resolución de problemas;
- e. Capacidad de gestionar un aprendizaje propio para contribuir al desarrollo autónomo, analizando bibliografía en forma criteriosa, empleando materiales propuestos por la cátedra y por los estudiantes, promoviendo producciones escritas u orales.

Correlativas Regulares para cursar:

Estructuras Biomoleculares

Modelado y Simulación de Macromoléculas

Correlativas Aprobadas para cursar:

Métodos Estadísticos

Correlativas Aprobadas para promocionar o rendir el examen final:

Primer año

Estructuras Biomoleculares

Métodos Estadísticos

Insercion de la Asignatura en el plan de Estudios:

Siendo el área de química computacional y, en especial dentro de ella, el de diseño racional y descubrimiento de drogas de gran interés y utilidad para la bioinformática y la biología computacional, resulta esencial que las y los alumnos dispongan de herramientas que les permitan analizar y dar respuestas a interrogantes biológicos de reconocimiento molecular, motivados por la curiosidad y la necesidad de hacer frente a desafíos que puedan abordarse con estas herramientas. En este marco, este espacio curricular buscará brindar al alumnado los conceptos teóricos y herramientas necesarias para utilizar los métodos de diseño de compuestos y reconocimiento molecular bajo modelado y simulación computacional a la hora de resolver problemas de índole biofísicoquímicos en el proceso de diseño de drogas. Se trabajará en hacer especial hincapié en desarrollar en estudiantes la capacidad crítica de evaluación de diversas problemáticas donde el proceso de diseño de drogas y el estudio de reconocimiento molecular en moléculas blancas puedan aportar valor a preguntas específicas que se busquen responder, identificando y generando espacios de discusión sobre sus alcances y limitaciones.

El descubrimiento moderno de medicamentos suele ser un proceso muy costoso que involucra grandes inversiones por parte de corporaciones de la industria farmacéutica y también de gobiernos nacionales. A pesar de los avances en la tecnología y la comprensión de los sistemas biológicos, el descubrimiento de fármacos sigue siendo un proceso largo, costoso, difícil e ineficiente, con una baja tasa de nuevos descubrimientos terapéuticos.

Aunque las técnicas de diseño para la predicción de la afinidad de unión son razonablemente exitosas, existen muchas otras propiedades, como la biodisponibilidad, la semivida metabólica, los efectos secundarios, etc., que deben optimizarse antes de que un ligando pueda convertirse en un fármaco seguro y eficaz. Estas otras características son a menudo difíciles de predecir con técnicas de diseño racional. Sin embargo, debido a los altos índices de deserción, especialmente durante las fases clínicas del desarrollo del fármaco, hace ya un tiempo se está prestando mayor atención al inicio del proceso de diseño del fármaco para seleccionar fármacos candidatos cuyas propiedades físico-químicas se predice que darán lugar a menos complicaciones durante el desarrollo y, por lo tanto, es más probable que conduzcan a una droga aprobada y comercializada. Además, los experimentos *in vitro* complementados con métodos de cálculo se usan cada vez más en el descubrimiento temprano de fármacos para seleccionar compuestos con ADME-T (absorción, distribución, metabolismo, excreción y toxicidad) más favorable y perfiles toxicológicos.

Es así que el descubrimiento moderno de medicamentos implica un diseño racional de compuestos

estrechamente relacionado a la química médica del huésped a considerar. Éste debe también considerar la optimización de dichos efectos para aumentar la afinidad, la selectividad (para reducir el potencial de los efectos secundarios), la eficacia / potencia, la estabilidad metabólica (para aumentar la vida media) y la biodisponibilidad oral. Una vez que se haya identificado un compuesto que cumpla con todos estos requisitos, comenzará el proceso de desarrollo del fármaco antes de los ensayos clínicos.

La asignatura "Diseño y descubrimiento de drogas" busca enfocarse en el estudio y comprensión de todo este proceso, donde las y los futuros Lic. en Bioinformática serán profesionales destacados para este tipo de trabajo, adquiriendo una formación interdisciplinaria con pilares como la química biológica y la informática, con fuerte hincapié en el desarrollo de análisis crítico de situaciones a abordar. Al finalizar la cursada las y los estudiantes tendrán el contexto actual de este gran área de constantes cambios y adaptaciones a nivel mundial, y además estarán familiarizadas/os con distintas herramientas para manejar grandes bases de datos de compuestos, filtrar aquellos de interés, someterlos al cumplimiento de reglas biofísicoquímicas, estudiar su estructura tridimensional / función unida a macromoléculas de interés, evaluar su afinidad por distintos blancos biológicos, analizar su selectividad y estabilidad metabólica e identificar perfiles toxicológicos.

Objetivo General:

Objetivos generales:

- Generar un espacio de aprendizaje que permita a estudiantes adquirir competencias que favorezcan su futuro desempeño como profesional.
- Proveer a estudiantes de los conceptos teóricos, prácticos y de herramientas necesarias para utilizar métodos del proceso de diseño de drogas y reconocimiento molecular al momento de resolver problemas de este índole, con un fuerte hincapié en el desarrollo de una capacidad crítica de análisis.
- Implementar metodologías innovadoras de evaluación formativa tendientes a mejorar el proceso educativo y la experiencia de estudiantes durante la cursada.

Objetivos Particulares:

- Presentar casos de estudio a partir de los cuales las y los estudiantes puedan identificar, formular y plantear posibles soluciones.
- Detectar de manera conjunta, entre docentes y estudiantes, necesidades actuales o potenciales de casos de estudio que requieran de una solución bioinformática, priorizando aquellos del proceso de diseño de drogas, evaluando también en forma comparativa las tecnologías disponibles para abordarlas.
- Alentar la búsqueda creativa de soluciones (generar nuevas ideas y/o nuevas maneras de enfocar o abordar lo ya conocido) y evaluar situaciones contextuales como oportunidades de innovación científico-tecnológica.
- Estimular a que estudiantes interpreten modelos, análisis y resultados (propios y ajenos) que se obtengan de la aplicación de las diferentes técnicas y herramientas brindados por este espacio curricular.
- Ejercitar la comunicación tanto escrita como oral, principalmente a través de la elaboración de informes escritos y presentaciones orales.
- Promover la autoevaluación y evaluación entre pares, identificando fortalezas, debilidades y potencialidades de las diferentes producciones de informes escritos y presentaciones orales de las y los estudiantes.
- Facilitar a estudiantes los fundamentos teóricos y conceptos claves necesarios que le permitan identificar qué tipo de preguntas de índole biofísicoquímicas es posible responder mediante cada una de las técnicas del proceso de diseño de drogas abordadas durante la cursada, identificando sus alcances y limitaciones asociadas.

Programa Analítico:

Unidad n° 1: Introducción al diseño y descubrimiento de drogas: la racionalidad

Presentación de los objetivos. Definiciones básicas. Introducción a las etapas involucradas durante un programa de diseño y descubrimiento de nuevas drogas. La fase preclínica del diseño de drogas: áreas científicas involucradas. El rol de la química medicinal en el diseño y optimización de nuevos agentes terapéuticos.

Unidad n°2: Introducción a la química medicinal computacional (QMC)

Conceptos básicos relacionados con la QMC. Aplicaciones de métodos de QMC. Complementación de enfoques experimentales y computacionales. Concepto de farmacóforo. Identificación de farmacóforos. Concepto de compuesto líder. Concepto de drogabilidad. Cribado de compuestos.

Unidad n°3: Modelado por homología

Fundamentos del modelado por homología. Etapas del proceso de modelado de la estructura proteica. Enfoques para el modelado de regiones conservadas y variables. Uso de múltiples moldes. Cómo evaluar la calidad del modelo. Errores comunes. Programas más ampliamente utilizados: Modeller - SwissModel.

Unidad n°4: Docking molecular

Introducción al diseño de drogas basadas en estructuras. Mecánica molecular aplicada al diseño de drogas: docking molecular. Revisión de los programas más utilizados. Docking rígido vs flexible. Actividades prácticas en el laboratorio de computación (TP 1, TP 2).

Unidad n°5: Metabolismo de drogas

Conceptos básicos. Fase farmacéutica. Fase farmacocinética, procesos ADME + T (Administración, Distribución, Metabolismo, Excreción + Toxicidad). Fase farmacodinámica. Caso de estudio.

Unidad n°6: Relaciones cuantitativas estructura-actividad (QSAR)

Historia de QSAR. QSAR clásico. Descriptores fisicoquímicos y biológicos de una molécula, propiedades electrónicas, hidrofóbicas y estéricas. Procedimiento de QSAR, series de exploración. Validación estadística de las ecuaciones multiparamétricas. Aplicaciones. Tendencias actuales.

Unidad n°7: Cribado virtual de compuestos

Bases de datos de compuestos químicos y bioactividad. Formatos utilizados para almacenar y procesar la

información química. Herramientas para la conversión de formatos. Métodos de comparación de estructuras químicas. Métodos de cribado basados en ligando vs métodos basados en estructura. Actividades prácticas en el laboratorio de computación (TP 3, TP 4).

Unidad n°8: Limitaciones de metodologías estudiadas

Discusión del estado del arte de las metodologías aprendidas. Limitaciones que presenta cada una. Hacia dónde van los desarrollos actuales (lectura y discusión de trabajos recientes). Dicha unidad será abordada desde la actividad práctica denominada "Análisis y presentación de publicaciones".

Fundamentación de la organización y secuenciación de los contenidos:

Las unidades temáticas 1-4 constituyen una introducción a los conceptos mínimos relacionados con un programa moderno de diseño y descubrimiento de drogas. En tal sentido se ha considerado una perspectiva desde la química, fisiología y ciencia farmacéutica, describiendo el rol de la bioinformática como un área complementaria a todas ellas.

En una segunda etapa (unidades 5-8) se avanza sobre los conceptos relacionados con técnicas modernas de búsqueda de compuestos y modelado molecular computacional. En tal sentido, se adquieren destrezas prácticas en actividades específicas que incumben al Lic. en Bioinformática en un equipo multidisciplinar abocado al diseño y descubrimiento de drogas. Dichas actividades están centradas esencialmente en las técnicas de modelado molecular de moléculas orgánicas, aplicación de técnicas teóricas para la simulación del reconocimiento intermolecular en sistemas biológicos (docking molecular) y procedimientos de dinámica molecular. Las unidades 5-8 están articuladas de manera de aplicar los conocimientos y fundamentos adquiridos durante el desarrollo de las unidades anteriores (1 a 4) a la resolución de problemas prácticos de relevancia concreta.

Metodología Didáctica:

Durante las clases teóricas se brindará a las/los estudiantes los conceptos necesarios para comprender los temas del programa presentado, enfocando en la presentación de ejemplos que promuevan discusiones y abordajes complementarios, y proponiendo situaciones que ayuden a asimilar y a entender los conceptos tratados. Se incentivará principalmente el desarrollo de una capacidad crítica en estudiantes para el abordaje de las problemáticas de índole biofísicoquímicas presentadas basado en el desarrollo de las competencias y consecuentes capacidades, explicitadas en la sección correspondiente.

El equipo docente guiará este proceso de adquisición de competencias proponiendo actividades que promuevan un aprendizaje basado en la propuesta, continua discusión y resolución de situaciones de índole biofísicoquímicas.

Se buscará así acompañar al estudiante en su propio proceso de aprendizaje a través del fomento de preguntas frecuentes, el diálogo y razonamientos en equipo. Al observar fenómenos, será clave dar a las y los estudiantes la oportunidad de formar sus propias ideas sobre lo que ocurre y de dar sus propias explicaciones, las cuales se someterán continuamente a debates de toda la clase presente. El docente ayudará al estudiante y a la audiencia presente a tomar conciencia de sus propias ideas preexistentes, dándole oportunidad para confrontarlas, debatirlas, afianzarlas y/o usarlas como andamiaje para llegar a ideas más elaboradas. A su vez, la destreza y competencias adquiridas no se remitirán solamente a los contenidos circunscritos en la asignatura, sino que configurarán un ejercicio y una experiencia que exceda este espacio, teniendo la capacidad de expandirse a otros horizontes según la necesidad de cada estudiante.

Las actividades prácticas se llevarán a cabo en forma individual o formando grupos de a dos personas (dependiendo de la cantidad de estudiantes que tome la cursada). Se entregarán guías de problemas con explicaciones que permitirán el seguimiento adecuado de las mismas en forma de tutorial, complementando la actividad con un acompañamiento de la/el docente buscando y presentando disparadores que ejerciten continuamente la capacidad crítica de las y los estudiantes. Todas las clases prácticas concluirán con una sección de cierre, llevado a cabo por los docentes, donde se analizarán y discutirán los resultados de los avances de cada actividad.

Detalle de la cantidad de horas por cada tipo de actividad:

Clases teóricas: 4 encuentros de 6hs cada uno (total de 24hs)

Clases prácticas: 5 encuentros de 6hs cada uno (total de 30hs). La actividad denominada "Análisis y

presentación de publicaciones" contempla 12hs extra áulicas donde las y los alumnos deben preparar los trabajos y presentaciones para dicha actividad.

Examen: 4hs

Se propone, a mediano plazo, la posibilidad de trabajar en el desarrollo de un abordaje integral de problemáticas que puedan ser abordadas en forma transdisciplinar entre varias cátedras, facilitando la integración de conceptos y el aprendizaje basado en la resolución de desafíos profesionales que involucren distintos escenarios y niveles de abordaje complementarios por las cátedras a participar, las cuales podrían ser las siguientes (sin restricción para otras no mencionadas): estructuras biomoleculares, análisis y alineamiento de secuencias, modelado y simulación de macromoléculas, genética, bioquímica, biología celular y molecular, comprensión lectora y producción escrita, base de datos e inteligencia artificial.

Formación Práctica:

Las instancias de formación práctica constarán de actividades en las cuales las y los estudiantes integrarán los contenidos vistos y discutidos en las clases teóricas utilizando distintas herramientas bioinformáticas con diferentes enfoques y grados de aproximación. Se les brindarán guías de problemas con explicaciones que permitirán el seguimiento adecuado de las mismas, en forma de tutoriales. Todas las clases prácticas concluirán con una sección de cierre, llevado a cabo por los docentes, donde se analizarán y discutirán los resultados de las simulaciones.

No habrá una marcada diferencia entre formación experimental y resolución de problemas, puesto que en este tipo de cursada la parte experimental y la resolución de problemas aplicados están muy interconectados y por ende es muy difícil establecer una diferenciación clara en cuanto a dedicación.

Listado de Actividades de Formación Práctica:

- TP 1: "Análisis avanzado de dinámica molecular"
- TP 2: "Métodos para la predicción de complejos proteína - droga"
- TP 3: "Cribado virtual de compuestos químicos"
- TP 4: "Toolkits para manejo de datos en quimioinformática"
- Análisis y presentación de publicaciones. Trabajo extra áulico de análisis profundo de una publicación científica enfocada en: i) complementar alguna de las temáticas abordadas en los contenidos teóricos o ii) integrar contenidos frente a un abordaje diferente / complementario a lo desarrollado durante la cursada. La/el estudiante deberá realizar un análisis exhaustivo de la metodología relacionada a los contenidos de la materia, junto a una interpretaciones y juicios de valor sobre publicación asignada. Se solicitarán juicios de valor frente a: metodología empleada para abordar la temática escogida por los autores de la publicación, solución elegida, resultados alcanzados, conclusiones, valoraciones sobre otras posibles alternativas de enfoque. Todo esto será presentado en modalidad oral con la ayuda de una presentación de diapositivas. Se promueve realizar tanto la presentación de diapositivas como la exposición oral en inglés, pero no es requisito indispensable hablar en inglés si la alumna/o no se siente cómoda/o. Luego de dicha presentación, se abrirá una ronda de preguntas por parte de la clase oyente.

Para el resto de los temas abordados en esta asignatura que podrían llegar a tener instancias de actividades prácticas, por una cuestión de tiempos, de carga horaria y de contenidos actualmente abordados para las y los estudiantes, no se harán clases prácticas específicas. Un conjunto de éstas serán tenidas en cuenta con ejemplos de aplicación tanto durante la cursada como en la última actividad práctica mencionada (Análisis y presentación de publicaciones).

Intensidad de la formación práctica

Detalle de la carga horaria total prevista para cada una de las siguientes actividades:

Actividades prácticas que aportan a las competencias específicas en el Nivel de dominio 1: 32 horas

Actividades prácticas que aportan a las competencias específicas en el Nivel de dominio 2: 0 horas

Actividades prácticas que aportan a las competencias específicas en el Nivel de dominio 3: 0 horas

Horas totales de actividades de formación práctica: 32 horas

Metodología de Evaluación Durante el cursado:

Se evaluará a las alumnas y alumnos mediante las siguientes instancias:

- Desenvolvimiento en actividades prácticas y cumplimiento de los objetivos planteados;
- Alcance de las capacidades establecidas en esta planificación, las cuales les ayudarán a desarrollar las competencias mencionadas;
- En caso de que la alumna o alumno pueda asistir y seguir correctamente todas las clases teóricas, se evaluará también su participación en ellas;
- Parcialito teórico-práctico en modalidad oral. Aquí se evalúa el seguimiento de la materia por parte de la alumna/o hasta el momento, cómo se han asimilado los conceptos, la congruencia entre unidades ya vistas en clases de teoría con aspectos prácticos, grado de avance en TPs con conceptos aplicados estudiados por la/el estudiante. La/ el estudiante culmina el parcialito con una devolución, sin nota, por parte de la cátedra para dimensionar dónde está parada/o, si viene bien desde el punto de vista de las/los docentes o si es necesario profundizar el estudio en los aspectos que no hayan alcanzado el nivel de conceptos e integración teórica/práctica considerado como requerido. Su objetivo es que las/los estudiantes lleguen bien preparadas/os al parcial;
- Parcial teórico-práctico integrador en modalidad oral. En esta instancia se evalúan todas las unidades dictadas, tanto teóricas como prácticas, y se asigna una nota;
- La asistencia a los encuentros presenciales sobre clases teóricas será considerada como requisito para regularizar o promocionar la materia.

Metodología de Evaluación en Exámenes Finales:

Alumnas/os regulares:

Parcial teórico-práctico oral integrador con una calificación mínima de 6/10 puntos.

Alumnas/os libres:

- Parcial teórico-práctico oral integrador con una calificación mínima de 6/10 puntos.
- Presentación escrita de todos los trabajos prácticos de la asignatura previamente resueltos y defensa oral de todos ellos con una presentación digital (tipo PowerPoint) por cada uno.

Condiciones de Regularidad :

Condiciones de regularidad y promoción:

La materia puede aprobarse por promoción directa. Para alcanzar esta condición la/el alumna/o deberá:

- Asistir al 80% de los encuentros
- Entregar todos trabajos prácticos (TPs) realizados a través de informes que deben ser finalmente aprobados. Se considerarán 2 posibles instancias de entrega, luego de la primera instancia se harán las devoluciones correspondientes para que la segunda entrega sea la final. De no considerarse un TP aprobado en esta segunda instancia de entrega, se perderá la posibilidad de promoción directa.
- Aprobar dos instancias de exámenes:
 - o un parcialito teórico-práctico oral;
 - o un parcial teórico-práctico oral integrador con una calificación mínima de 8/10 puntos.

Para alcanzar la condición de regularidad, se exigirá:

- Asistir al 80% de los encuentros;
- Aprobar todos los trabajos prácticos, con informes correspondientes entregados bajo la misma modalidad mencionada anteriormente. A diferencia de la condición de promoción, si no se aprueba un TP, podrá recuperarse en la instancia de recuperación (ver debajo);
- Aprobar un parcial teórico-práctico oral integrador con una calificación mínima de 6/10 puntos.
- Habrá una instancia de recuperación de la condición de regularidad al final de la cursada, en modalidad oral, ya sea para entregar y defender los trabajos prácticos previamente desaprobados (presentando informes escritos actualizados) o para rendir nuevamente el parcial integrador teórico-práctico desaprobado.

En el caso que una alumna/o deba rendir ambos (TPs + parcial integrador), tendrá 2 instancias de recuperación, una para cada evaluación, la 1era en la semana 15 y la 2da en la semana 16. Para poder rendir el recuperatorio, deben haber asistido a la instancia del parcial teórico-práctico integrador y deben haberlo rendido, salvo que la alumna o alumno presente una fundamentación por escrito que avale el motivo de inasistencia al parcial.

Cronograma de parciales durante el primer Cuatrimestre:

Cronograma de parciales durante el segundo Cuatrimestre:

Primer Examen Parcial: 19 de Septiembre de 2024

Segundo Examen Parcial: 07 de Noviembre de 2024

Recuperatorio 01: 14 de Noviembre de 2024

Recuperatorio 02: 21 de Noviembre de 2024

Bibliografía Principal:

- Gareth Thomas, "Medicinal Chemistry: An Introduction", Ed. Wiley Interscience, 2008.
- Thomas L Lemke and David A. Williams, "Foye's Principles of Medicinal Chemistry", Ed. Lippincott Williams & Wilkins, 2007.
- Donald J. Abraham "Burger's Medicinal Chemistry and Drug Discovery, Drug Discovery and Drug Development", 6ta. Ed., Volúmenes 1-6, Ed. John Wiley & Sons, 2003.
- Hans-Joachim Bohm, Gisbert Schneider, Raimund Mannhold, and Hugo Kubinyi, "Protein-Ligand Interactions: From Molecular Recognition to Drug Design", Ed. WILEY-VCH, 2003.
- Christopher J. Cramer, "Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models", 2da. Edición, John Wiley & Sons, 2004
- Manual de referencia de Amber 2023. (<https://ambermd.org/Manuals.php>)
- Videos de YouTube que se serán compartidos durante las clases.
- Publicaciones científicas.

Bibliografía Complementaria:

Equipo de Cátedra:

Profesor responsable de la materia, Prof. Dr. Juan Pablo Bustamante. La tarea del profesor responsable es el dictado de la totalidad de los contenidos teóricos del seminario, ya sea de las clases netamente teóricas, como así también de los fundamentos teóricos de los trabajos prácticos.

Jefe de Trabajos Prácticos (JTP), Dra. Cecilia Gómez. La tarea del JTP consiste en el dictado de los TPs de computación, complementándose con el profesor responsable en el seguimiento de los alumnos durante los TPs. También es responsable de la actualización y redacción de la guía de trabajos prácticos.

Actividades de Investigación Gestión y Extensión:

Se propone continuar con una integración entre este área curricular de docencia junto a una de investigación y formación de recursos humanos, tal como se viene materializando al momento en la dirección de 2 tesis de Licenciatura en Bioinformática. Dichas integraciones han sido en áreas de investigación de posibles drogas antivirales para infecciones por rinovirus y en un estudio computacional de hidrólisis enzimática de prodrogas anti-HIV.

En cuanto a extensión, se propone continuar participando de talleres y espacios de difusión y vinculación con colegas, estudiantes y otros espacios de difusión tanto académica como profesional que puedan ir surgiendo. Un ejemplo es la oportunidad presentada durante la pandemia por SARS-CoV-2, en la cual se brindaron charlas y un taller haciendo especial hincapié en los aportes que brindó a nivel científico el abordaje del estudio de posibles blancos terapéuticos para atacar al virus, basado en conceptos y estrategias abordadas tanto en la asignatura Modelado y simulación de macromoléculas como en la de Diseño y descubrimiento de drogas.

Requisitos de admisión para alumnos oyentes:

Sin requisitos particulares.

Infraestructura, equipamiento y recursos necesarios:

Laboratorio con computadoras que tengan sistema operativo Linux Ubuntu, computadoras que posean placas de video y más de 8GB de RAM.

Otros: