

Curso "Diseño y descubrimiento de fármacos. Desarrollo de medicamentos"

Contenidos teóricos:

1. Organización de un programa de diseño y desarrollo de fármacos: etapas involucradas, problemáticas generales y desafíos modernos.
2. Estrategias clásicas y modernas para el descubrimiento de fármacos. Búsqueda de líderes y prototipos.
3. Relaciones cuantitativas estructura-actividad (QSAR) aplicadas a la optimización de un prototipo. Conceptos básicos y avanzados. QSAR multidimensional.
4. Diseño de Fármacos asistido por computadoras: Cribado virtual y modelado molecular computacional. Estudios conformacionales, docking y dinámica molecular. Enumeración virtual de quimiotecas.
5. Aspectos biofarmacéuticos relacionados con el desarrollo de fármacos y medicamentos.
6. Estudios de preformulación de fármacos. Estrategias generales. Aspectos fisicoquímicos.
7. El escenario clínico del desarrollo de fármacos y medicamentos. Etapas involucradas. Estudios de eficacia y seguridad antes y después del registro y comercialización de un medicamento.
8. Protección intelectual de desarrollos farmacéuticos. Patentes farmacéuticas: situación mundial y en Argentina.

Contenidos de las actividades prácticas y teóricas-prácticas:

1. Herramientas para visualización y análisis molecular. Análisis de patrones de interacción intermolecular ligando-receptor. Bases de datos de estructuras cristalográficas.
2. Cribado virtual de quimiotecas de fármacos. Manejo y filtrado de bases de datos. Cálculos de descriptores moleculares.
3. Construcción y análisis de modelos de Relaciones Cuantitativas Estructura-Actividad.

Bibliografía general y específica:

1. The Practice of Medicinal Chemistry. Edited by C. G. Wermuth. 3ra ed. Elsevier Inc. 2008.
2. Comprehensive Medicinal Chemistry II. Volume 1: Global Perspective y Volume 2: Strategy and Drug Research. Editors-in-Chief: John B. Taylor and David J. Triggle. Elsevier. 2006.
3. A Primer on QSAR/QSPR Modeling: Fundamental Concepts. Kunal Roy, SupratikKar, Rudra Narayan Das. Springer. 2015.
4. Drug Discovery and Development. Volume 1: Drug Discovery. Edited by Mukund S. Chorghade. John Wiley & Sons, Inc. 2006.
5. New Drug Discovery and Development. Daniel Lednicer. John Wiley & Sons, Inc. 2007.
6. The Process of New Drug Discovery and Development. Edited by Charles G. Smith, James T. O'Donnell. 2da ed. Informa Healthcare USA, Inc. 2006.
7. Drug Discovery and Development. Technology in Transition. Edited by H. P. Rang. Churchill Livingstone Elsevier Inc. 2006.
8. Drug-like Properties: Concepts, Structure Design and Methods: from ADME to Toxicity Optimization. Edward H. Kerns and Li Di. Elsevier Inc. 2008.
9. Fuentes bibliográficas primarias de reciente edición que serán indicadas durante el desarrollo del curso.
10. An Introduction to Medicinal Chemistry. G.L. Patrick, OUP Oxford. 2013.
11. Structure-based Design of Drugs and Other Bioactive Molecules: Tools and Strategies. A.K. Ghosh, S. Gemma, Wiley: 2014.
12. Introduction to Bioinformatics. A. Lesk, OUP Oxford: 2013.
13. Pharmaceutical Preformulation and Formulation. A Practical Guide from Candidate Drug Selection to Commercial Dosage Form. M Gibson, ed. 2º Edition, New York: Informa Healthcare Inc. USA. 2009.