

Disseny de nous fàrmacs

PRESENTACIÓ

Aquest curs ha estat dissenyat per un equip de professionals del Sector BIOINFORMÀTIC, que han treballat sota la coordinació i supervisió del BIB (Bionformatics Barcelona).

OBJECTIUS

En acabar el curs, els participants coneixeran i sabran treballar amb les eines computacionals que es fan servir en el disseny de nous fàrmacs. En concret:

- Reconeixerà les diverses formes d'obtenció de nous fàrmacs i la utilització de les eines quimioinformàtiques en aquesta recerca.
- Reconeixerà els models 3D moleculars en la recerca de nous fàrmacs, i les diferents tècniques de simulació per ordinador en l'àmbit de la modelització molecular.
- Sabran consultar, modificar i gestionar la informació emmagatzemada en bases de dades d'estructures químiques i les dades utilitzades per realitzar modelitzacions moleculars, emprant els procediments, funcions i guions incorporats en el llenguatge de manipulació de dades.
- Sabran treballar adequadament amb les eines i aplicacions d'ús habitual en el disseny de nous fàrmacs.
- Seran capaços d'elaborar informes relacionats amb les dades obtingudes a partir de les eines quimioinformàtiques utilitzades.

CONTINGUTS

1. Els fàrmacs i els receptors:

- 1.1 Els fàrmacs. Finalitats. Formes farmacèutiques i medicaments.
- 1.2 Biodisponibilitat i farmacocinètica. ADME.
- 1.3 Estructura de les proteïnes.

1.4 Receptors. Interacció fàrmac-receptor: agonistes, antagonistes, etc.

1.5 Estructura espacial de les molècules. Models 3D moleculars. Enllaços intermoleculars. Grups funcionals.

2. Eines informàtiques en el disseny de nous fàrmacs:

2.1 Bases de dades d'estructures químiques.

2.2 Obtenció de dades. Filtrat. Mètodes de cerca.

2.3 Cribatge virtual 2D (virtual screening).

2.4 Eines per la cerca i el disseny de farmacòfors.

2.5 Eines per l'acoblament molecular (docking): AutoDock i AutoGrid.

2.6 Eines per simulació de dinàmica molecular: Gromacs, Amber i Charmm.

2.7 Eines pel modelat per homologia: Swiss-Model.

2.8 Enregistrament de resultats i elaboració d'informes.

TITULACIÓ

Diploma emès per Bioinformatics Barcelona i les Escoles Universitàries Gimbernat i Tomás Cerdá (adscrites a la Universitat Autònoma de Barcelona).

CAMPUS VIRTUAL

Els participants en el Curs tindran accés al Campus Virtual de les Escoles Universitàries, on disposaran d'un conjunt d'eines de comunicació i col.laboració entre participants i professorat, a més d'un repositori documental.

ACCÉS

Per a accedir a aquest curs NO és necessari disposar de titulació universitària. Es permet l'accés a professionals del sector Bioinformàtic, o a persones que per les seves inquietuds personals siguin considerades aptes per a seguir amb normalitat els continguts.

PROFESSORAT

Ferran Briansó, <https://www.linkedin.com/pub/ferran-brians%C3%B3/18/475/123> ,
Bioinformàtic en actiu en la Unitat d'Estadística i Bioinformàtica del VHIR; i
Ignasi Belda <https://www.linkedin.com/pub/ignasi-belda/2/6a5/835>),

DATES I PREUS

El curs té una durada de 100 hores (Calendari i Horaris pendents de concretar).

El cost del curs és de 900 euros (750 euros per graduats de Gimbernat, i membres del BIB)