

Programa

Día 1: 20 de junio de 2011

- 08:30-09:00 Registro y entrega de documentación
- 09:00-09:15 Presentación del curso
Prof. Federico Gago
- 09:15-10:00 Introducción al diseño computacional de fármacos
Prof. Federico Gago
- 10:00-10:30 Introducción a *docking*: algoritmos
Dr. Antonio Morreale
- 10:30-11:00 Introducción a *docking*: funciones de puntuación (scoring)
Dr. Antonio Morreale
- 11:00-11:30 Pausa para café**
- 11:30-12:00 El programa de *docking* GLIDE
Dra. Sonsoles Martín
- 12:00-12:30 El programa de *docking* DOCK
Dra. Almudena Perona
- 12:30-13:00 El programa de *docking* AutoDock
Dr. Garrett Morris
- 13:00-13:30 El programa de *docking* Surflex
D. Álvaro Cortés
- 13:30-14:00 La plataforma de *docking* VSDMIP
Dr. Antonio Morreale

14:00-15:30 Comida

15:30-16:30 Introducción a PyMOL

16:30-17:30 DOCK: *docking*

17:30-18:00 Pausa para café

18:00-19:30 DOCK: cribado virtual

Día 2: 21 de junio de 2011

09:00-11:00 AutoDock: *docking*

11:00-11:30 Pausa para café

11:30-13:30 AutoDock: cribado virtual

13:30-15:00 Comida

15:00-17:00 Surfex: *docking* y cribado virtual

17:00-17:30 Pausa para café

17:30-19:30 Glide: *docking* y cribado virtual

21:00-23:00 Cena del curso

Día 3: 22 de junio de 2011

10:00-12:00 VSDMIP: *docking*

12:00-12:30 Pausa para café

12:30-14:30 VSDMIP: cribado virtual

14:30-16:00 Comida

16:00-18:00 Preparación del informe de resultados

18:00-18:30 Pausa para café

18:30-19:30 Comparativa de programas y exposición de resultados

19:30-20:00 Conclusiones generales y cierre del curso

20:30-23:00 Reunión social