

Desarrollo de nuevos antibióticos: del genoma al fármaco

Dr. Adrián Turjanski

IQUIBICEN - FCEN - CONICET - UBA

- **Lunes 3 de noviembre a las 13 hs.**
- **Aula: RFP 3er piso DQIAQF/INQUIMAE**
- **Transmisión por nuestro canal de YouTube**

Resumen

En este seminario presentaré un recorrido actual del descubrimiento de antibióticos guiado por bioinformática, integrando IA/ML, genómica y métodos biofísicos. A partir del genoma de patógenos inferimos características contextuales, estructurales y químicas que permiten priorizar blancos terapéuticos y vincularlos con candidatos moleculares mediante cribado virtual. Una vez seleccionados los compuestos, avanzamos con validación experimental en ensayos in vitro y modelos in vivo. Para habilitar este flujo, desarrollamos herramientas propias para asignar compuestos a bolsillos de unión, ejecutar dinámica molecular y docking con sesgos físico-químicos realistas. Además, mostraré una aplicación completa a tuberculosis.