

## **MODELADO MOLECULAR DE ESTRADIOL Y SU RECEPTOR PROTEICO. INTRODUCCIÓN DE CONCEPTOS BÁSICOS EN CURSOS DE QUÍMICA ORGÁNICA.**

Andrés A. Poeylaut–Palena y María de los Ángeles Laborde

Instituto de Química Rosario. Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas –  
Universidad Nacional de Rosario – CONICET, Suipacha 531, S2002LRK Rosario,  
Argentina. e-mail: laborde@iquir-conicet.gov.ar

Como cualquier otra área de conocimiento, la Química Orgánica evoluciona día a día. Sin embargo, los contenidos teóricos o los ejercicios realizados dentro de los cursos tomados en nuestras Universidades pueden no acompañar esta evolución. Desde hace un largo tiempo, el modelado molecular es parte central de la química moderna.<sup>1</sup> Como parte de un proceso de actualización en la currícula de Química Medicinal en nuestra facultad nos dedicamos al desarrollo de una serie de Trabajos Prácticos de Química Computacional.<sup>2</sup>

El mayor esfuerzo fue puesto en la redacción de los manuales de indicaciones para llevar adelante los ejercicios a modo de perfeccionar el flujo de la información. Las órdenes a ser ejecutadas en el programa y las cuestiones relacionadas al manejo del mismo fueron eliminadas del cuerpo del texto y transcritas en una tabla adjunta. Esto deja la discusión vacía de todo concepto relacionado al manejo del software, fundamental para el desarrollo del trabajo práctico. En esta serie de ejercicios los alumnos aprenden conceptos elementales del modelado molecular y su aplicación a problemáticas comúnmente encontradas en el ambiente de la Química Orgánica. Las actividades están centradas en el modelado molecular de la hormona esteroidea estradiol y avanzan para terminar observando cuestiones emparentadas con la Química Medicinal tales como modelos moleculares de proteínas en complejo con estradiol y medicamentos conocidos. A través de las observaciones realizadas, los alumnos pueden comprender cabalmente el modo de funcionamiento de las de los modelos moleculares optimizados en un primer momento.

A lo largo de los años de desarrollo e implementación esta serie de Trabajos Prácticos fue dictada para casi 300 alumnos obteniendo una muy buena performance tanto en el desarrollo de los ejercicios como en la captación de conocimiento. Ante una encuesta anónima que preguntaba por la complejidad e interés generado por el ejercicio el 86% respondió que la complejidad era baja mientras que el 96% opinó que era muy interesante.

Estos trabajos prácticos contribuyeron en gran medida a la actualización del curso de Química Medicinal que se dicta en nuestra Facultad. Los alumnos son capaces de observar muchos aspectos que hasta aquí les resultaban abstractos en extremo. Nociones básicas como la interacción de un fármaco con su sitio de acción que por lo general son mantenidas en un plano teórico aquí son observadas con sus propios ojos utilizando información de altísima calidad que se encuentra disponible en forma libre y gratuita. Los materiales necesarios para su dictado son sencillos por lo que esperamos que pueda ser de aplicación para cursos dictados en otras Universidades.

### **Referencias**

1.- (a) Leach, A., Molecular Modelling: Principles and Applications. 2<sup>nd</sup> ed.; Prentice Hall: 2001. (b) Hinchliffe, A., Modelling Molecular Structures. John Wiley & Sons, LTD, 2000.

2.- Mata, E.G.; Laborde, M.d.I.A; Boggian, D.B.; Méndez, L.; Poeylaut–Palena, A.A.; Cornier, P.G.. Trabajos Prácticos de Química Medicinal. Rosario: UNR Editora. 2010.