

UNA VISION PRESENTE Y PROSPECTIVA DE LA QUIMICA MEDICINAL COMPUTACIONAL

R. D. Enriz* y F. D. Suvire

*Cátedra de Química Medicinal, Facultad de Química Bioquímica y Farmacia, Universidad Nacional de San Luis. Chacabuco 917, 5700, San Luis, Argentina. IMIBIO-SL-CONICET
E-mail: denriz@unsl.edu.ar*

Resumen

Este artículo discute diferentes aspectos de un campo de la investigación en el cual están convergiendo una gran cantidad y variedad de técnicas y métodos computacionales, la Química Medicinal Computacional (QMC). Nunca antes se ha estado tan cerca de cumplir uno de los principales anhelos de la industria farmacéutica como es el diseño “desde el principio” de una droga. Sin embargo, existe aún un cierto camino por recorrer para llegar a ese objetivo, en el cuál los químicos medicinales computacionales deberán agudizar al máximo su sagacidad, ingenio y creatividad para sortear los últimos obstáculos que nos separan de tamaño logro. Se discute en este trabajo nuestro punto de vista personal sobre las aproximaciones actuales de la QMC empeladas para el diseño de drogas y también las perspectivas futuras en este campo.