

HERRAMIENTAS BIOINFORMÁTICAS PARA EL ESTUDIO DE LA ESTRUCTURA DE PROTEINAS

Curso Educación Permanente - Facultad de Ciencias, UdelaR
8-31 de agosto de 2011

Objetivos del curso: Brindar una panorámica y entrenamiento básico en el uso de herramientas químico/bioinformáticas para la visualización, análisis, clasificación, predicción y validación de la estructura 3D de proteínas.

Equipo docente: **Responsables** - Dras. Adriana Esteves (Prof. Adj. Bioquímica, IB-IQB) y Laura Coitiño (Prof. Agr. Química Teórica y Computacional, IQB).

Colaboran: Dras. Alicia Merlino (Prof. Adj. Quím. Teórica y Comp., IQB) y Ada Czerwonogora (Articuladora TICUR-Facultad de Ciencias).

Programa Teórico

1. Introducción a la Bioinformática como campo científico interdisciplinar. Ubicación de la Bioinformática Estructural de Proteínas en su contexto. Visualización, análisis, clasificación y predicción de la estructura 3D.
2. Representación y análisis asistido por computadora de la arquitectura molecular de proteínas (aminoácidos, niveles de organización estructural, modificaciones post-traducción, interacción con ligandos, etc.). Criterios de clasificación de proteínas. Actualización IUPAC 2011 sobre la definición del *enlace de hidrógeno*.
3. Obtención de información estructural generada con técnicas experimentales: bases y bancos de datos estructurales. Representación 3D y análisis a partir de archivos en formato PDB. Bases de datos de clasificación estructural (SCOP, CATH). El repositorio SWISS-MODEL (portal ExPASy).
4. Estructura molecular/macromolecular ¿realidad o modelo? Evolución de las formas de representación gráfica molecular en el tiempo. Diferencias entre visualización, generación de estructuras representativas desde unidades básicas promedio del polímero y predicción computacional de la estructura macromolecular.
5. Comparación y alineamiento de la estructura 3D. Métodos para la predicción de la estructura 3D de proteínas (*Threading, Homología y Ab initio*) y su confiabilidad. Etapas a cubrir en la predicción por homología.
6. Proyecto aplicado: pautas para su desarrollo y elaboración del informe final. La plataforma Moodle como entorno para el acompañamiento a distancia de los proyectos.

Programa Laboratorio Computacional

1. Reconocimiento de los niveles de organización y análisis estructural de proteínas (estructura primaria, secundaria, modificaciones post-traduccionales, sitios de interacción/unión de ligandos) con programas de uso simple: **Deep View (Swiss-PDB-Viewer), Cn3D, DS Visualizer**.
2. Acceso, visualización y descarga desde bases de datos estructurales públicas: **RSC PDB Databank, JMol y Ligand Explorer**. Bases de clasificación de proteínas: **SCOP y CATH**. Repositorios en el servidor **ExPASy**.
3. Visualizando distintos tipos de representación molecular. Construcción de estructuras representativas a partir de la secuencia. **Hyperchem 8.0, DS Visualizer**, otros paquetes.
4. Predicción por homología de la estructura proteica 3D: a) alineamiento de secuencias y búsqueda de proteínas homólogas: **Clustal y Blast**. b) predicción de estructuras y su validación: **SWISS-Model Workspace (ExPASy Server)**.
5. Presentación de los temas seleccionados para proyectos. Introducción a la plataforma Moodle.

Bibliografía

Principios de Bioquímica. D.L. Nelson, A.L. Lehninger & M.M. Cox, **2008**. W. H. Freeman.

Fundamentos de Bioquímica D. Voet & J.G. Voet, 2^{da} Ed., **2007**. Editorial Médica Panamericana.

Structural Bioinformatics. P. E. Bourne & H. Weisse (Eds.), **2003**. Wiley-Lyss, Hoboken, NJ.

Carga horaria: 30 hs presenciales concentradas del 8-12 de agosto (dos sesiones de 3 hs c/u, de 9-12 y de 13-16 hs) y 15 hs con apoyo tutorial a distancia para el desarrollo de un proyecto aplicado.

Ganancia del curso: Asistencia al 80% de las 30 hs presenciales y entrega del informe escrito del proyecto aplicado (actividad calificada) no más allá del 31/08/2011.

Inscripciones, Cupos, Matrícula, Becas y Consultas

Cupo: mínimo 6 personas, máximo 20.

Matrícula: 1.000 pesos (cubre coffee breaks y materiales del curso).

Becas: está prevista la asignación de un número limitado de becas totales/parciales ante presentación de nota fundamentando la solicitud. **El plazo para solicitarlas vence el 25/07/11.**

Inscripciones: Hasta el 1/08/11 en la Unidad de Educación Permanente de Facultad de Ciencias.

Consultas: aesteves@fcien.edu.uy/laurac@luna.fcien.edu.uy