

PROGRAMA DEL CURSO 2018:

HERRAMIENTAS BIOINFORMÁTICAS PARA EL ESTUDIO DE PROTEÍNAS: VISUALIZAR, COMPRENDER Y PREDECIR.

Día	ACTIVIDADES
Lunes 3/12	<ul style="list-style-type: none"> • MAÑANA, 10h00-13h00hr <p>Introducción del curso-taller, presentación de los estudiantes y docentes, descripción de los programas informáticos a utilizar.</p> <p>Teórico: <i>Estructura de proteínas: visualización de proteínas, interacciones moleculares.</i> <i>Docente Andrea Villarino</i></p> <p>Teórico-práctico: <i>Manejo de Chimera. Visualización de estructuras en diferentes niveles. Diagrama de Ramachandran. Dipolos. Puentes de hidrógeno.</i> <i>Docente: Fernando Herrera</i></p> <ul style="list-style-type: none"> • TARDE, 14h00-17h00hr <p>Teórico-Práctico: <i>Almacenamiento y organización de la información experimental sobre estructura de proteínas.</i> Bases de datos de proteínas. Protein Data Bank (PDB) y sus derivadas.</p> <p>Bases de Datos de organización estructural de proteínas: SCOP y CATH. Métodos de predicción de motivos estructurales y dominios funcionales a partir de la secuencia de una proteína.</p> <p>Programas visualizadores de las estructuras de proteínas. Visualización de mapas de densidad electrónica.</p> <p><i>Docentes responsables: Dr. Fernando Herrera y Dra. María Natalia Lisa</i> <i>Docentes ayudantes: Dras. Mabel Berois y Andrea Villarino</i> <i>Estudiante de posgrado ayudante: Juan Marizcurrena</i></p>
Martes 4/12	<ul style="list-style-type: none"> • MAÑANA, 10h00-13h00hr <p>10h00-11h00. Charla de la docente invitada Dra. Maria Natalia Lisa: <i>Cristalografía de proteínas y otras herramientas estructurales para entender fuerzas motrices en la evolución de la vida.</i></p> <p>11h00-11h15. Preguntas</p> <p>11h15-12h15. Charla de la docente invitada Dra. Laura Coitiño: <i>Integración de la bioinformática estructural y el modelado computacional hacia el estudio in silico de la estructura e interacciones (no covalentes y reactivas) de proteínas. Selección de casos representativos abordados en el Laboratorio de Química Teórica y Computacional.</i></p> <p>12h15-12h30. Preguntas</p> <p>12h30-13h00. Evaluación de los estudiantes</p> <ul style="list-style-type: none"> • TARDE, 14h00-17h00hr <p>Teórico-Práctico: <i>Medición de parámetros estructurales en proteínas y análisis de mapas de densidad electrónica . Ejercicios individuales.</i> <i>Docentes responsables. Dr. Fernando Herrera y Dra. María Natalia Lisa</i> <i>Docentes ayudantes: Dras. Mabel Berois y Andrea Villarino</i> <i>Estudiante de posgrado ayudante: Juan Marizcurrena</i></p>
Miércoles 5/12	<ul style="list-style-type: none"> • MAÑANA, 10h00-13h00hr <p>10h00-11h00. Charla de la docente invitada Dra. Annemarie Wehenkel: <i>Structural approach for the study of molecular mechanisms of actinobacterial cell division.</i></p> <p>11h00-11h15. Preguntas</p> <p>11h15-12h15. Charla de docente invitado Dr. Sergio Pantano: <i>Métodos de simulación simplificados para el estudio de la dinámica de grandes sistemas moleculares.</i></p> <p>12h15-12h30. Preguntas</p> <p>12h30-13h00. Evaluación</p> <ul style="list-style-type: none"> • TARDE, 14h00-17h00hr <p>Teórico-Práctico: <i>Alineamiento de secuencias, identidad y similitud de secuencias, homología.</i></p>

	<p>Alineamiento local, global, blast y múltiple. Alineamiento estructural.</p> <p><i>Docentes responsables. Dr. Fernando Herrera y Dra. María Natalia Lisa</i></p> <p><i>Docentes ayudantes: Dras. Mabel Berois y Andrea Villarino</i></p> <p><i>Estudiante de posgrado ayudante: Juan Marizcurrena</i></p>
Jueves 6/12	<ul style="list-style-type: none"> • MAÑANA, 10h00-13h00hr <p>Teórico-Práctico: Predicción de la estructura terciaria basada en homología de proteínas. Métodos de predicción por ensamblado de estructuras conservadas. Modelado del esqueleto peptídico en zonas conservadas y en loops. Modelado de las cadenas laterales. Servidor SWISS-MODEL.</p> <p><u>Análisis de la calidad de los modelos tridimensionales obtenidos:</u> Detección de posibles problemas estéricos: Mapa de Ramachandran. Detección de distancias, ángulos de enlace y ángulos diedros anómalos: programas What If y PROCHECK. Detección de zonas de plegamiento problemático: QMEAN, VERIFY-3D, entre otros. Performance de diferentes predictores de estructura.</p> <p><i>Docentes responsables: Dr. Fernando Herrera y Dra. María Natalia Lisa.</i></p> <ul style="list-style-type: none"> • TARDE, 14h00-17h00hr <p>Teórico-Práctico: Métodos que satisfacen restricciones espaciales: MODELLER. Inclusión de restricciones propiedades fisicoquímicas.</p> <p><u>Refinamiento de los modelos:</u> Corrección de errores en el alineamiento. Nueva búsqueda de Homólogos utilizando métodos secuencia-perfil, perfil-secuencia y perfil-perfil.</p> <p>Dinámica Molecular con restricciones.</p> <p><i>Docentes responsables. Fernando Herrera y María Natalia Lisa.</i></p>
Viernes 7/12	<ul style="list-style-type: none"> • MAÑANA, 10h00-13h00hr <p>10h00-11h00. Charla de la docente Dra. Andrea Villarino: <i>Estudio de la fosfatasa de tirosina micobacteriana como potencial factor de virulencia modulador del metabolismo eucariota.</i></p> <p>11h00-12h00. Charla de la docente Dra. Mabel Berois: <i>Estudio del factor de virulencia la fosfatasa en tirosina del virus Orf: de la caracterización estructural a la exploración de sus mecanismos de interacción en la célula eucariota.</i></p> <p>12h00-13h00. Charla del estudiante de posgrado Juan Marizcurrena: <i>Aplicación de herramientas bioinformáticas (en especial la utilidad del modelado molecular) en el estudio de una fotoliasa bacteriana.</i></p> <ul style="list-style-type: none"> • TARDE, 14h00-17h00hr <p>Ejercicios individuales aplicando los conocimientos.</p> <p><i>Docentes responsables. Fernando Herrera y María Natalia Lisa.</i></p>
Lunes 10/12	<ul style="list-style-type: none"> • MAÑANA, 10h00-13h00hr <p>10h00-11h00. Charla de la docente invitada Dra. Gwenaëlle André-Leroux: <i>Towards the Structural Screening of Microbial Ecosystems</i></p> <p>11h-13h. Teórico-Práctico. Introducción a PyMol, mediante ejemplos concretos.</p> <ul style="list-style-type: none"> • TARDE, 14h00-17h00hr <p>Teórico- Práctico: <u>Predicción de interacciones moleculares y docking:</u> Predicción de interacciones moleculares a partir de la estructura 3D: interacciones proteína-ligando, proteína-DNA, proteína-RNA y proteína-proteína. Predicciones, basadas en la estructura de sitios activos de enzimas. Predicción de complejos macromoleculares por docking. Programas Autodock y Autodock vina. Performance de las predicciones en competencias CAPRI.</p> <p><i>Docentes responsables: Dras. Gwenaëlle André-Leroux y María Natalia Lisa.</i></p> <p><i>Docentes ayudantes: Dras. Mabel Berois y Andrea Villarino</i></p> <p><i>Estudiante de posgrado ayudante: Juan Marizcurrena</i></p>
Martes 11/12	<ul style="list-style-type: none"> • MAÑANA y TARDE <p>Continuación Teórico- Práctico: <u>Predicción de interacciones moleculares y docking</u></p>

	<p><i>Docentes responsables. Gwenaëlle André-Leroux y María Natalia Lisa.</i></p> <p><i>Docentes ayudantes: Mabel Berois y Andrea Villarino</i></p> <p><i>Estudiante de posgrado ayudante: Juan Marizcurrena</i></p>
Miércoles 12/12	<ul style="list-style-type: none"> • MAÑANA y TARDE <p>Taller práctico. ESTUDIO DE PROTEINAS DE INTERES DE LOS ESTUDIANTES PARTICIPANTES</p> <p><i>Docentes responsables. Gwenaëlle André-Leroux y María Natalia Lisa.</i></p> <p><i>Docentes ayudantes: Mabel Berois y Andrea Villarino</i></p> <p><i>Estudiante de posgrado ayudante: Juan Marizcurrena</i></p>
Jueves 13/12	<ul style="list-style-type: none"> • MAÑANA y TARDE <p>Taller práctico. ESTUDIO DE PROTEINAS DE INTERES DE LOS ESTUDIANTES PARTICIPANTES</p> <p><i>Docentes responsables. Gwenaëlle André-Leroux y María Natalia Lisa.</i></p> <p><i>Docentes ayudantes: Mabel Berois y Andrea Villarino</i></p> <p><i>Estudiante de posgrado ayudante: Juan Marizcurrena</i></p>
Viernes 14/12	<ul style="list-style-type: none"> • MAÑANA <p>Taller práctico. ESTUDIO DE PROTEINAS DE INTERES DE LOS ESTUDIANTES PARTICIPANTES</p> <p><i>Docentes responsables. Gwenaëlle André-Leroux y María Natalia Lisa.</i></p> <p><i>Docentes ayudantes: Mabel Berois y Andrea Villarino</i></p> <p><i>Estudiante de posgrado ayudante: Juan Marizcurrena</i></p> <ul style="list-style-type: none"> • TARDE <p>Evaluación: presentación oral e informe individual de los resultados obtenidos durante el trabajo de laboratorio con el modelo proteico elegido.</p>