

Curso Latinoamericano de cristalografía de Macromoléculas.

18

14. PROGRAMA ANALITICO

Seminarios en cristalografía de Macromoléculas.

Parte Teórica:

Teoría de la cristalización. Métodos y estrategias para cristalizar macromoléculas (matrices, aditivos).
 Criocristalografía. Átomos pesados. Selenoderivados. Fuentes de rayos X. Descripción del generador y detector in-house. Sincrotrones
 Generalidades de cristalografía de rayos X. Teoría de difracción: ondas, espacio recíproco. Simetría, grupos espaciales. Factores de estructura.
 Colección de datos de difracción: indexado, estrategia, procesamiento, validación.
 El problema de las fases I: MIR-MAD. Funciones de Patterson. Modificación de densidad.
 El problema de las fases II: reemplazo molecular.
 Construcción manual. Parámetros a tener en cuenta durante la construcción manual (rotameros, distancias, ángulos)
 Afinamiento. *Maximum likelihood*. *Simulated annealing*. Factores R. *Constraints*. *Restraints*. Validación.
 Parámetros de control de calidad de la estructura (Ramachandran, etc). Análisis de la estructura: superposiciones y alineación por estructura, rms, contactos, puentes de hidrógeno, etc
 Genómica estructural: adaptaciones de la metodología de difracción de rayos X a la alta performance y automatización.

15.- BIBLIOGRAFIA

Crystallography Made Crystal Clear, 2nd. Ed., Gale Rhodes, Academic Press, San Diego, CA, 2000.
Principles of Protein X-Ray Crystallography, 2nd Ed., Jan Drenth, Springer Verlag, NY, 1999.
Practical Protein Crystallography, Duncan McRee, Academic Press, San Diego, CA, 1999.

FECHA 12/2/2004

FIRMA PROFESOR:

Aclaración firma: Ana A. Cauerrhff

FIRMA DIRECTOR:

Sello Aclaratorio:

LUIS A. QUESADA ALLUE
 DIRECTOR TITULAR
 Instituto de Investigaciones
 Químicas - IQUIA - UBA