



Universidad de Buenos Aires
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales
Departamento de Química Biológica
Pabellón II 4º piso, Ciudad Universitaria
(1428) Buenos Aires, Argentina

Q.B. 2010
12

PROGRAMA ANALITICO - Bioinformática

Bases de datos

Bases de datos de proteínas. Bases de datos de ADN. Bases de Datos 1rias (Genebank, EMBL, Swiss-Prot, TrEMBL, PDB). Base de Datos 2rias: Pfam, Gene-Ontology, Base de datos de Genomas. Algoritmos, complejidad y heurísticas. Diseño y mantenimiento de bases de Datos.

Análisis de secuencias

Introducción de probabilidad y estadística. Alineamiento global por pares. Alineamiento Múltiple. Generación de Matrices de score. Dot-Plot. Programación dinámica. PAM. BLOSUM. BLAST. FASTA. Búsquedas por similitud de secuencia. Patrones de secuencias y perfiles. Análisis de familias de proteínas. Filogenia molecular. Identificación y modelado de genes. Análisis y comparación de genomas. Análisis de variación poblacional. Clustal-W. Pfam. Prosite. Prints. Blocks.

Estructura de Proteínas

Conceptos básicos de interacciones atómicas (non-covalent, non-bonded): electrostáticas, puentes salinos, uniones hidrógeno, Efectos del solvente. Interacciones hidrofóbicas. Estructura de Proteínas y Conformación. Amino ácidos: Características funcionales de las cadenas laterales. Unión peptídica. Estructura primaria. Estructura secundaria: α -hélices, 3_{10} -hélices, plegamiento β . Estructura terciaria.

Métodos para la determinación y estudio de estructuras de biomoléculas

Métodos de predicción de estructura secundaria. DSSP. Matrices de distancias. Rotámeros. Threading. Modelado comparativo. Métodos de predicción de estructura terciaria ab-initio. Búsqueda de motivos estructurales. Alineamiento 3D. Hashing geométrico. Evaluación de calidad de modelos. What-Check. Clasificación de plegamientos. Métodos de determinación de plegamientos. SCOP. CATH. Mecanismo de plegamiento de proteínas. Teoría de plegamiento. Métodos de determinación automática de plegamientos. CASP.

Interacciones entre biomoléculas

Bases moléculares de reconocimiento específico. Interacción proteína-proteína. Interacción proteína-ADN. Interacción droga-proteína. Predicción de interacciones. Predicción de estructuras. Monte carlo. Algoritmos genéticos. Docking. Clustering. Métodos evolutivos. Bases de datos de interacciones. BIND. DIP.CAPRI.

PROGRAMA TRABAJOS PRACTICOS

Perfil de los Trabajos Prácticos: 2 veces por semana (3 hrs/día trabajo). 6 semanas.

Bases de datos: Bases de datos: Sitios Populares de Bioinformática, Búsquedas en bases de datos: el NCBI y entrez, Análisis de registros. Gene-Ontology.



Universidad de Buenos Aires
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales
Departamento de Química Biológica
Pabellón II 4º piso, Ciudad Universitaria
(1428) Buenos Aires, Argentina

Alineamiento I: Alineamiento de Secuencias: Dot-plot. Alineamiento, Búsqueda en base de datos por BLAST. Alineamiento Múltiple. Construcción de Árboles Filogenéticos (Caso real Kinasas). Búsqueda y uso de bases de datos secundarias: PFAM.

Alineamiento II: Programación de un algoritmo de alineamiento, análisis y generación de las matrices de scoring.

Estructura de proteínas: Manejo de programas de visualización. Visualización de estructuras de proteínas. Análisis de motivos. Análisis de interacciones entre biomoléculas. Uso del PDB, Entrez y PDBsum.

Predicción de estructura de proteínas: Modelado Comparativo. Uso de Modeller. Ejemplos puntuales. Análisis por What-Check.

Interacción proteína-ligando: Docking proteína ligando: (Caso real inhibición Kinasas). Comparación de algoritmos.

Docking proteína-proteína: Programas existentes. Predicción mediante métodos rígidos de Docking proteína-proteína (Casos simples). Métodos flexibles.

BIBLIOGRAFIA

- Bioinformatics: A Practical Guide to the Analysis of Genes and Proteins. Andreas D. Baxevanis, B. F. Francis Ouellette.
- Bioinformatics: Sequence and Genome Analysis. David W. Mount.
- Structural Bioinformatics (Methods of Biochemical Analysis, V. 44) Philip E. Bourne, Helge Weissig
- Developing Bioinformatics Computer Skills. Cynthia Gibas, Per Jambeck.
- Statistical Methods in Bioinformatics. Warren J. Ewens, Gregory R. Grant
- Protein Structure Prediction - A Practical Approach, M. J. E. Sternberg editor, Oxford University Press, 1996.
- Introduction to Protein Structure, C. Branden and J. Tooze Garland Publishing, Inc. New York and London, 1999.