



Universidad de Buenos Aires  
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales  
Departamento de Química Biológica

## DEPARTAMENTO DE QUÍMICA BIOLÓGICA

### CURSO DE POSTGRADO O SEMINARIO

AÑO: 2015

- 1) NOMBRE DEL CURSO/SEMINARIO: bioinformatica
- 2) NOMBRE Y APELLIDO DEL RESPONSABLE: Adrian Turjanski
- 3) DOCENTES QUE COLABORAN EN EL DICTADO DEL CURSO: Marcelo Marti, Patricio Craig, Juan Pablo Arcon
- 4) FECHA DE INICIACIÓN: 16/3/2015 FECHA DE FINALIZACIÓN: 7/7/2015
- 5) CANTIDAD DE HORAS TOTALES DE DICTADO:
  - a) TEORICAS:
  - b) SEMINARIOS:
  - c) LABORATORIO:
  - d) CLASES TEORICAS-PRACTICAS: 120hs
- 6) FORMA DE EVALUACIÓN: 2 Parciales
- 7) LUGAR DE DICTADO: Laboratorios del DC
- 8) PUNTAJE QUE OTORGA PARA EL DOCTORADO: 5
- 9) Nº DE ALUMNOS: Mínimo: 5 Máximo: 40
- 10) ARANCEL PROPUESTO: 20
- 11) PROGRAMA ANALÍTICO Y BIBLIOGRAFÍA DEL CURSO:

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.



Universidad de Buenos Aires  
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales  
Departamento de Química Biológica

### **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:  $\alpha$ -hélices,  $3_{10}$ -hélices, plegamiento  $\beta$ . 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 moleculares 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 Bioninformática, Búsquedas en bases de datos: el NCBI y entrez, Análisis de registros. Gene-Ontology.

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.

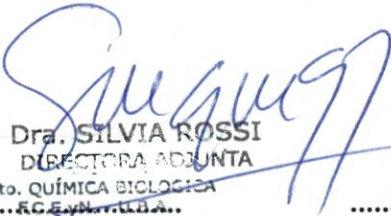


Universidad de Buenos Aires  
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales  
Departamento de Química Biológica

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

### **BIBLIOGRAFIA**

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

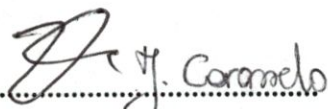
  
Dra. SILVIA ROSSI  
DIRECTORA ADJUNTA

Dpto. QUÍMICA BIOLÓGICA  
F.C.E.N. - UBA

  
DR. ADRIAN TURJANSKI  
Prof. F.C.E.N. - UBA  
INVESTIGADOR CONICP

.....  
VºBº Del Departamento

.....  
Firma del Responsable

  
.....  
VºBº de la Subcomisión de Doctorado



Universidad de Buenos Aires  
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Referencia Expte. N° 495.500/08

Buenos Aires, 11 MAY 2015

VISTO:

la nota presentada por la Dra. Silvia Rossi, Directora del Departamento de Química Biológica, mediante la cual eleva la información del curso de posgrado **Bioinformática**, que será dictado desde el 16 de marzo al 7 de julio de 2015 por el Dr. Adrián Turjanski, con la colaboración del Dr. Marcelo Martí, el Dr. Patricio Craig y el Lic. Juan Pablo Arcon

CONSIDERANDO:

- lo actuado por la Comisión de Doctorado,
- lo actuado por la Comisión de Posgrado,
- lo actuado por este cuerpo en Sesión Ordinaria realizada en el día de la fecha,
- en uso de las atribuciones que le confiere el Artículo N° 113° del Estatuto Universitario,

EL CONSEJO DIRECTIVO DE LA FACULTAD  
DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES  
RESUELVE:

Artículo 1°: Autorizar el dictado del curso de posgrado **Bioinformática** de 120 hs. de duración.

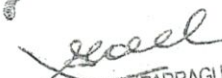
Artículo 2°: Aprobar el programa del curso de posgrado **Bioinformática**, obrante a fs 44 a 46 del expediente de la referencia.

Artículo 3°: Aprobar un puntaje máximo de cinco (5) puntos para la Carrera del Doctorado.

Artículo 4°: Comuníquese a la Dirección del Departamento de Química Biológica y a la Biblioteca de la FCEyN (con fotocopia del programa incluida). Comuníquese a la Secretaría de Posgrado (sin fotocopia del programa). Cumplido archívese.

Resolución CD N°  
SP / ga / 04/05/2015

1007

  
Dr. JOSÉ OLABE PARRAGUIRRE  
SECRETARIO DE POSGRADO  
FCEN - UBA

  
Dr. JUAN CARLOS REBOREDA  
DECANO