



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

11) PROGRAMA ANALÍTICO Y BIBLIOGRAFÍA DEL CURSO:

PROGRAMA ANALITICO - Biología Estructural

Interacciones moleculares y Termodinámica

Uniones covalentes. Modelos mecano-cuánticos. Interacciones atómicas (non-covalent, non-bonded): electrostáticas, puentes salinos, uniones hidrógeno, fuerzas de Van der Waals, fuerzas de London. Dipolos: permanentes, transitorios. Efectos del solvente. Interacciones hidrofóbicas. Agua. Rol en los sistemas biológicos. Campos de fuerzas empíricos: mecánica molecular. Potenciales de campo medio y potenciales polarizables. Campos de fuerzas para agua y para biomoléculas. Concepto de superficie de energía potencial. Relación entre propiedades microscópicas y macroscópicas: espacio de las fases y propiedades termodinámicas. Energía libre. Constante de equilibrio. Energía de activación. Velocidad de reacción. Control termodinámico y cinético.

Modelado Molecular de biomoléculas

Métodos de simulación de Monte Carlo y Dinámica Molecular. Análisis de resultados de simulación y estimación de errores. El problema del mínimo global. Métodos de minimización. Recocido simulado. Resolución de primeros principios de estructuras de proteínas utilizando simulaciones de dinámica molecular. Plegamiento de proteínas. Modelado comparativo. Alineamiento de secuencias. Utilización de bases de datos y homologías. Estimación de energías libres. Potencial de fuerza media. Efectos del solvente. Simulación de la unión de proteínas a ligandos. Docking. Bases de datos tridimensionales. Bioinformática. Captura de los datos originados en las mediciones bioquímicas. Protein Data Bank. Sitios útiles en Internet. Archivos. Tratamiento de los datos. Recuperación de la información.

Métodos para la determinación de estructuras de biomoléculas

Difracción de rayos X. Refinación de estructuras. Determinación de estructuras en solución. Resonancia magnética nuclear. Fundamentos. Resonancia magnética nuclear bidimensional. Efecto nuclear Overhauser. Microscopía electrónica a bajas temperaturas. Dicroísmo circular. Fluorescencia. Espectroscopía de Masas aplicada a biomoléculas. MALDI.

Estructura de Proteínas

Estructura de Proteínas y Conformación. Amino ácidos: Características funcionales de las cadenas laterales. Unión peptídica (amida, imida). Estructura primaria. Degradación de Edman. Grupos funcionales: derivatización de las proteínas. Estructura secundaria: α -hélices, 3_{10} -hélices, plegamiento β . Estructura terciaria. Plegamiento proteico. Interacciones intramoleculares: puentes hidrógeno, electrostática, hidrofóbica. Caminos del plegamiento proteico. Diagramas de Ramachandran. Clasificación de las estructuras proteicas. Cambios conformacionales. Inducción por ligandos. Chaperonas. Estructura cuaternaria. superficie de contacto. Propiedades espectroscópicas de proteínas. Aplicaciones. Proteínas globulares. Proteínas fibrosas. Evolución Molecular. Agregación de proteínas y patogénesis. Ingeniería y biotecnología de proteínas.



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

PROGRAMA TRABAJOS PRACTICOS

Perfil de los Trabajos Prácticos: 2 veces por semana (4 hrs/día trabajo). Ocho semanas.

Fluorescencia: fundamentos, solventes, ciclodextrinas, proteínas. Interacción proteína/ligando

Dicroísmo circular: fundamentos, calibración,

Cristalografía: lisozima, difracción de rayos X.

Biosensor: interacciones proteína-proteína

Interacciones moleculares

Modelado de biomoléculas

BIBLIOGRAFIA

- Physical Chemistry: Principles and Applications in Biological Sciences, 4th edition. I. Tinoco, et al, Prentice Hall, 2002.
- Molecular Modeling, A.R. Leach, Longman, 1996.
- Computational Chemistry, G. H. Grant, W. Graham Richards, Oxford Chemistry Primers, Oxford University Press, 1996.
- Computer Simulation of Liquids, M. P. Allen and D. J. Tildesley, Oxford University Press, 1987.
- 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.
- Crystallization of Biological Macromolecules. Edited by Alexander McPherson. CSHL Press, New York 1999 (USA).
- Proteins. Structures and molecular properties. Edited by Thomas Creighton. W. H. Freeman and Company, New York, 1996.
- Protein Folding Handbook, Edited by J. Buchner and T. Kiefhaber. Wiley-VCH, 2005
- Structure and mechanism in protein science. A. Fersht, W. H. Freeman and Company, New York, 1999.
- Principles of Fluorescence Spectroscopy. Joseph R. Lakowicz. 3^{ra} edición. Ed. Springer, 2006


.....
V^oB^o Del Departamento

Dra. SANDRA M. RUZAL
DIRECTORA
Dep. QUÍMICA BIOLÓGICA
C.E.Y.N. - U.B.A.


.....
Firma del Responsable


.....
V^oB^o de la Subcomisión de Doctorado





Universidad de Buenos Aires
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Referencia Expte. N° 503.954/14

Buenos Aires,

24 AGO 2015

VISTO:

la nota presentada por la Dra. Sandra Ruzal, Directora del Departamento de Química Biológica, mediante la cual eleva la información del curso de posgrado **Biología estructural**, que será dictado durante el segundo cuatrimestre de 2015 (desde el 12/08/2015 al 27/11/2015) por el Dr. Julio Javier Caramelo con la colaboración del Dr. Adrián Turjanski, el Dr. Darío Estrín, el Dr. Ricardo Wolosiuk, el Dr. Daniel Murgida, el Dr. Diego Ferreiro, el Dr. Marcelo Martí, el Dr. Patricio Craig y el Lic. Guillermo Lobo,

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 **Biología estructural** de 158 hs. de duración.

Artículo 2°: Aprobar el programa del curso de posgrado **Biología estructural**, obrante a fs 13 y 14 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 Dirección de Alumnos y a la Secretaría de Posgrado (sin fotocopia del programa). Cumplido archívese.

2012

Resolución CD N°

SP / ga / 18/08/15

Dr. PABLO J. PAZOS
Secretario Adjunto de Posgrado
FCEyN. - UBA

Dr. JUAN CARLOS REBORADA
DECANO