

CURSO DE POSTGRADO

Bioinformática y estructura de macromoléculas

Nombre Curso
SEMESTRE 2º AÑO 2020

PROF. ENCARGADO Mauricio Baez y Victor Castro

Nombre Completo

Cédula Identidad

Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas, Facultad de Ciencias, Universidad de Chile

UNIDAD ACADÉMICA

TELÉFONO 9987583111
229781649 E-MAIL Mauricio.baez@ciq.uchile.cl

TIPO DE CURSO Avanzado

(Básico, Avanzado, Complementario, Seminarios Bibliográficos, Formación General)

CLASES	30 HRS.
SEMINARIOS Y TALLERES	12 HRS.
TRABAJO PRESENCIAL	03 HRS.

Nº HORAS PRESENCIALES	45
Nº HORAS NO PRESENCIALES	135
Nº HORAS TOTALES	180

CRÉDITOS 8

(1 Crédito Equivale a 27 Horas Semestrales)

CUPO ALUMNOS 2 10

(Nº mínimo)

(Nº máximo)

PRE-REQUISITOS

INICIO Junio de 2020

TERMINO Septiembre de 2020

DIA/HORARIO
POR
SESION Miércoles 9.00 a 12 hrs.

DIA / HORARIO
POR SESION Miércoles 9.00 a 12 hrs

LUGAR

Sala de Matemáticas (o online), Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas,
Sergio Livingstone (ex Olivos) Nº 1007

Escuela De Postgrado (Sala a determinar) u otro lugar

METODOLOGÍA

El curso consta de quince (15) semanas de clases organizados en:

- 13 clases teórico-prácticas
-

(Clases, Seminarios, Prácticos)

EVALUACIÓN (INDICAR % DE CADA EVALUACIÓN)

Requisitos asistencia	Clases
Trabajo de Seminarios	100 %

PROFESORES PARTICIPANTES (INDICAR UNIDADES ACADÉMICAS)

- Dr. Vinicius Maracaja Coutinho, Facultad Ciencias Químicas y Farmacéuticas, Universidad de Chile
- Dr. Víctor Aliaga Tobar, Facultad Ciencias Químicas y Farmacéuticas, Universidad de Chile
- Dr. Víctor Castro, Facultad Ciencias, Universidad de Chile.
- Dr. Pablo Villalobos, Facultad Ciencias, Universidad de Chile.
- Dr. Ricardo Cabrera, Facultad Ciencias, Universidad de Chile
- Dr. Maximiliano Figueroa Universidad de Concepción.
- Dr. Gerald Zapata (por confirmar)

DESCRIPCIÓN / OBJETIVOS

El objetivo del curso es que el estudiante conozca metodologías y herramientas computacionales útiles para el estudio y la función de proteínas, el análisis de sus cambios conformacionales, la predicción de estructuras y herramientas de Docking. Consta de cinco módulos de actividades prácticas y teóricas. Entre las actividades prácticas se consideran talleres computacionales guiados por el docente. Cada módulo será evaluado en formato de informes o control.

Módulo I. Vinicius Maracaja, Victor Aliaga, (Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas Universidad de Chile). Introducción, Introducción a sistemas Linux y Shell Scripting.

Módulo II. Víctor Castro. (Facultad de Ciencias, Universidad de Chile). Llenar.

Módulo III. Pablo Villalobos y Profesor Ricardo Cabrera (Facultad de Ciencias, Universidad de Chile).

- Definición de dominio y Relaciones filogenéticas en proteínas. Comparación de estructuras de proteínas
- Tutorial VMD y Multiseq.

Módulo IV. Pablo Villalobos

- Introducción a la simulación molecular, Aproximación de Born-Oppenheimer, Dinámica Hamiltoniana, Campos de fuerza, Integración de las leyes de Newton.
- Métodos en simulación molecular, Minimización energética, Dinámica molecular.
- Acoplamiento molecular, Análisis de simulación molecular, Parámetros de orden, MSD, Corrientes iónicas, volúmenes, estadística
- Potencial electrostático, Campos de Fuerza y programas de Dinámica Molecular. Predicción de interacciones moleculares y movimientos atómicos de macromoléculas biológicas (Proteínas y DNA) mediante el uso de campos de Fuerza.

Módulo V. Profesor Gerald Zapata (Por confirmar, Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas).

- Docking Molecular y diseño de Fármacos.
- Taller Modelamiento comparativo y Docking.

Modulo VI. Maximiliano Figueroa (Universidad de Concepción). Herramientas de diseño de proteínas.**BIBLIOGRAFÍA**

Material entregado por los profesores y guías de seminario

Semana	Clase	TEMA	Docente
1	15/06	Introducción, manejo básico de comandos y consola /Taller	Vinicius Maracaja
2	22/06	Introducción, manejo básico de comandos y consola /Taller .	Victor Aliaga
3	29/06	Shell Scripting	Víctor Aliaga
4	07/07	Estructuras cristalográficas que información contiene y archivos PDB. Análisis de estados de oligomerización.	Víctor Castro
5	14/07	Análisis Filogenético, concepto de Fold. Mutaciones correlacionadas	Ricardo Cabrera/Pablo Villalobos
6	21/07	Taller Superposición de estructuras. VMD/Multiseq	Ricardo Cabrera/Pablo Villalobos
7	28/07	Modelado de estructura de proteína	Víctor Castro
8	04/08	Taller Modelado comparativo y evaluación.	Víctor Castro
9	11/08	Introducción a la simulación molecular	Pablo Villalobos
10	18/08	Taller preparación de sistemas, generación de archivos para correr una SM.	Pablo Villalobos
11	25/08	Taller de Análisis de trayectorias de simulación molecular	Pablo Villalobos
12	01/09	Taller de Docking Molecular	Gerald Zapata, por confirmar
13	08/09	Diseño de Fármacos	Gerald Zapata, por confirmar
14	15/09	Predicción de estructura proteínas Rosseta.	Maximiliano Figueroa
		Taller, predicción de estructura proteínas Rosseta	Maximiliano Figueroa

LUGAR

Clases y Seminarios Online

Escuela De Postgrado (Sala a determinar) u otro lugar