

## Localización

Aula de Informática, Facultad de Física  
Universidade de Santiago de Compostela  
Campus sur  
Santiago de Compostela

## Horarios

La duración total del curso es de 30h (3 créditos). Las clases tendrán lugar en el Aula de Informática de la Facultad de Física en horario de 9:00 a 13:30, y de 15:30 a 19:00.

## Inscripción

- Preinscripción: 10-21 Noviembre 2008
- Matrícula: 24-28 Noviembre 2008

El precio de la matrícula es de 35€. Incluye:

- Material del curso: libro de programa y tutoriales
- Pausa-café
- Certificado Oficial expedido por la USC

El curso está subvencionado por la Rede Galega de Bioinformática

## Secretariado

David Rodríguez Díaz  
Fundación Pública Galega de Medicina  
Xenómica  
Tel: 981 563100 ext 13873  
e-mail: cpfc.bioestructural@gmail.com

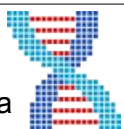
## Comité Organizador

Dr. Ángel Piñeiro  
Departamento de Física Aplicada  
Universidade de Santiago de Compostela

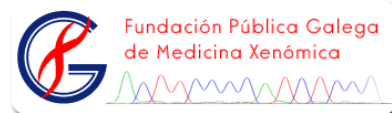
Dr. Hugo Gutiérrez de Terán  
Fundación Pública Galega de Medicina  
Xenómica  
SERGAS

## Colaboran

Rede  
Galega  
Bioinformática

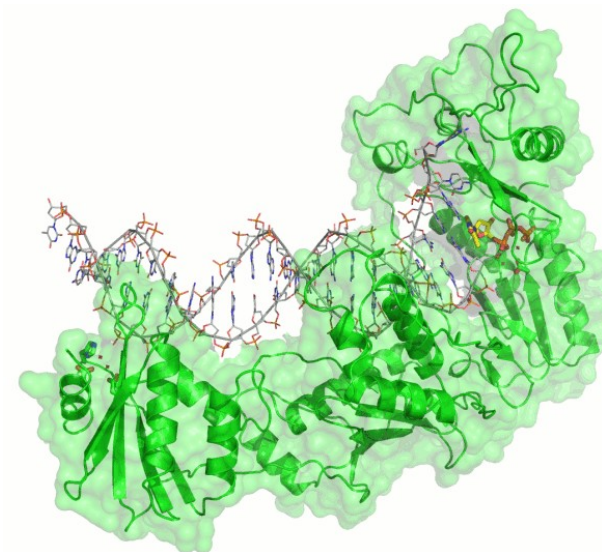


Unidade de Postgrao  
Decanato da Facultade de Física



## CURSO DE BIOINFORMÁTICA ESTRUCTURAL:

## MODELIZACIÓN Y SIMULACIÓN DE MOLÉCULAS BIOLÓGICAS



Santiago de Compostela  
1-4 diciembre 2008  
Facultade de Física, USC



Título Oficial  
Curso de Formación Continua (3 créditos)  
Universidade de Santiago de Compostela

## CONTENIDO DEL CURSO

Nuestra propuesta consiste en dar una introducción general de las aproximaciones bioinformáticas y metodologías computacionales de uso común en el área de la biología estructural y el diseño molecular. En concreto, abordaremos los siguientes tópicos:

I) Introducción a la biología estructural, métodos experimentales.

II) Generación de modelos computacionales de proteínas: modelización por homología.

III) Simulación computacional de macromoléculas biológicas: dinámica molecular.

IV) Estudios de asociación molecular: formación de complejos proteína-proteína o fármaco-proteína: técnicas de docking y predicción computacional de afinidades.

La introducción teórica a cada una de estas técnicas será ilustrada con ejemplos prácticos en sesiones de ordenador sobre casos seleccionados, utilizando los métodos del "estado del arte" en bioinformática estructural y diseño de medicamentos asistido por ordenador.

Con la formación obtenida, estimamos que el alumno-investigador sea capaz de entender, plantear y resolver problemas relacionados con la caracterización estructural de macromoléculas biológicas, como son: estudios de estabilidad o cambios conformacionales de proteínas, diseño de compuestos que se unan a las mismas, predicción de afinidades y efectos funcionales de mutaciones.

### DIRIGIDO A:

investigadores pre o postdoctorales, sin excluir alumnos de grado con una formación suficiente en Bioquímica, Física, Química y Química Orgánica.

## PROGRAMA

### Lunes, 1 de diciembre

#### 1- Estructura de Moléculas Biológicas

1.1- Estructura de proteínas: Cristalografía de rayos X. (Mark van Raaij, CSIC)

1.2- Resonancia Magnética Nuclear (RMN): Aplicaciones al descubrimiento de fármacos. (Víctor S. Pedregal, USC)

1.3- Introducción al entorno computacional de bioinformática estructural: SO Linux y visualización molecular. (Hugo G. de Terán, FPGMX / Angel Piñeiro, USC)

### Martes, 2 de diciembre

#### 2- Modelización por Homología

(Baldomero Oliva, UPF)

2.1- Modelización por homología. Conceptos básicos y programas más representativos.

2.2- Caso estudio: modelización de proteínas por métodos de homología.

### Miércoles, 3 de diciembre

#### 3- Dinámica Molecular

(Angel Piñeiro, USC)

3.1- Dinámica molecular (MD): Introducción a la mecánica molecular. Campos de Fuerzas. Algoritmos de dinámica molecular. Introducción al programa GROMACS.

3.2- Caso Estudio: Dinámica molecular de una proteína con GROMACS. Análisis de trayectorias.

#### 4- Docking: Anclaje Ligando-Proteína

(Hugo G. de Terán, FPGMX)

4.1- Introducción al Docking: Algoritmos de búsqueda. Funciones de tanteo (Scoring)

4.2- Caso Estudio: Determinación de un complejo ligando-proteína con AutoDock

### Jueves, 4 de diciembre

#### 5- Estimación Computacional de Afinidades Biológicas

(Johan Åqvist, Uppsala Universitet & Hugo G. de Terán, FPGMX)

5.1- Simulaciones de Energía libre. Perturbación de Energía libre (FEP)

5.2- Métodos simplificados de estimación de Energía libre: Linear Interaction Energy (LIE) y otros métodos.

5.3. Caso Estudio: Estimación de afinidades utilizando métodos de dinámica molecular: LIE y FEP

## PROFESORADO

Mark van Raaij

Científico Titular

Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)

Víctor Sánchez Pedregal

Investigador Ramón y Cajal

Universidade de Santiago de Compostela

Baldomero Oliva

Profesor Titular

Universitat Pompeu Fabra (Barcelona)

Ángel Piñeiro

Investigador Parga Pondal

Universidade de Santiago de Compostela

Hugo Gutiérrez de Terán

Investigador Parga Pondal

Fundación Pública Galega de Medicina Xenómica  
Santiago de Compostela

Johan Åqvist

Catedrático de Universidad

Universidad de Uppsala (Suecia)