



Curso de Doctorado 2003-2004

## Estructura tridimensional de macromoléculas biológicas

Director: Guillermo Montoya

Profesores: Francisco Blanco , Ramón Campos, Jerónimo Bravo y Joaquín Dopazo

Lugar: CNIO. Melchor Fernández Almagro, 3. 28029 Madrid

Fecha: Segundo semestre de 2004

Evaluación: Presentación crítica de un artículo científico.

Clase de curso: Metodológico. Créditos: 4. Carácter: Optativo. Límite de alumnos: 20

Descripción: El curso de **Estructura tridimensional de macromoléculas biológicas** tiene como objetivo principal proporcionar una introducción rigurosa y didáctica de la estructura tridimensional de macromoléculas y de los métodos de determinación estructural utilizados actualmente. El curso incluye, junto a las presentaciones teóricas, prácticas ilustrativas sobre cristalización de macromoléculas, recolección de datos de difracción de rayos X y de resonancia magnética nuclear para la resolución de estructuras atómicas, modelado de estructuras, diseño de proteínas y uso de páginas web que proporcionan herramientas de utilidad en biología estructural. Se pretende que tras cursar esta asignatura el alumno, aunque no sea un biólogo estructural, disponga los conocimientos necesarios para extraer la información esencial de los trabajos de este área de la biología molecular

### Programa preliminar:

#### Introducción

- Propiedades químicas y físicas de las macromoléculas biológicas y sus componentes
- Niveles de complejidad estructural

#### Métodos experimentales

- Cristalografía de difracción de rayos X
  - Cristalización de macromoléculas
  - Teoría de la difracción de ondas electromagnéticas
  - Determinación del grupo espacial de un cristal y reducción de datos
  - El problema de la fase y métodos de resolución
  - Refinamiento y validación de estructuras

## Espectrometría de resonancia magnética nuclear

- El fenómeno de la RMN
- Necesidades y limitaciones de la RMN de biomoléculas
- Espectroscopía heteronuclear y multidimensional
- Asignación de espectros
- Recolección de restricciones estructurales
- Cálculo de estructuras
- Análisis de la dinámica molecular
- Aplicaciones particulares de RMN en estado sólido

## Microscopía electrónica

- Principios
- Reconstrucción estructural a partir de promediado de partículas individuales
- Crio-cristalografía de electrones

## Métodos teóricos

- Modelado por homología
- Engarzado molecular
- Métodos ab initio

## Validación y análisis de estructuras

- Calidad de las estructuras
- Clasificación y análisis comparativos

## Utilidad de la estructura

- Diseño de proteínas
- Diseño de drogas
- Genómica estructural y funcional