



1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Modelización matemática aplicada al análisis de datos biofísicos en el desplegamiento de proteínas

Descripción general (resumen y metodología):

En el contexto de la disciplina de la Química Física Biológica, el análisis matemático de datos calorimétricos y espectroscópicos con modelos termodinámicos y cinéticos da una información muy valiosa de la energética de la estabilidad de las proteínas. Partiendo del modelo más simple, el denominado “dos estados”, en el que se plantea un equilibrio termodinámico entre dos especies, una nativa y otra desplegada, la complejidad puede ir aumentando a modelos – también en equilibrio – con fenómenos asociativos, o algunos en los que el proceso de desplegamiento es irreversible y se produce bajo control cinético. El análisis de datos experimentales con dichos modelos proporciona información cuantitativa que, combinada con datos estructurales, puede servir de base para diseñar mutantes en que se mejore la estabilidad. Este TFG versa sobre cómo analizar dichos datos, partiendo de modelos más simples a más complejos, usando más de un programa informático.

Tipología: Estudio de casos, teóricos o prácticos, relacionados con la temática del Grado.

Objetivos planteados:

1. Hacer análisis con modelos sencillos, esencialmente el dos estados, para familiarizarse con la metodología.
2. Realizar una búsqueda bibliográfica de diversos modelos más complejos para implementar dichos modelos en los programas informáticos.
3. Analizar los datos experimentales de distintas proteínas que tienen fenómenos asociativos en su desplegamiento y/o cuyo desplegamiento sea irreversible y con control cinético.

Bibliografía básica:

van Holde, K.E., Curtis Johnson, W., Shing Ho, P. (1998) Physical biochemistry. Prentice Hall.
Costas, M., et al (2009) J Mol Biol 385(3):924-37. doi: 10.1016/j.jmb.2008.10.056. Between-Species Variation in the Kinetic Stability of TIM Proteins Linked to Solvation-Barrier Free Energies
Murciano-Calles et al (2010) Biophys J. 99(1):263-72. doi: 10.1016/j.bpj.2010.04.003. An oligomeric equilibrium intermediate as the precursory nucleus of globular and fibrillar supramacromolecular assemblies in a PDZ domain

Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:

Es oportuno que el estudiante tenga conocimientos de química física biológica básica, y podrá obtener algún conocimiento extra del mismo campo. También debe estar familiarizado con análisis de datos con ordenador, particularmente el uso de Solver en Excel, aunque esto en todo caso lo aprenderá durante el desarrollo del TFG.

Plazas: 1

2. DATOS DEL TUTOR/A:

Nombre y apellidos: JAVIER MURCIANO CALLES

Ámbito de conocimiento/Departamento: QUÍMICA FÍSICA

Correo electrónico: jmurciano@ugr.es

3. COTUTOR/A DE LA UGR (en su caso):

Nombre y apellidos:

Ámbito de conocimiento/Departamento:

Correo electrónico:

4. COTUTOR/A EXTERNO/A (en su caso):

Nombre y apellidos:

Correo electrónico:

Nombre de la empresa o institución:

Dirección postal:

Puesto del tutor en la empresa o institución:

Centro de convenio Externo:

5. DATOS DEL ESTUDIANTE:

Nombre y apellidos:

Correo electrónico: