

Título: Simulación de procesos moleculares de relevancia fisicoquímica y biológica.

Tipo: Programa I+D

Fecha de inicio: 02/05/2019

Finalización: 30/04/2024

Directora/o: Fornasari, Silvina

Co-directora/o: Fernández Alberti, Sebastián

Resumen: Se propone el desarrollo e implementación de métodos computacionales aplicados a la simulación de procesos dinámicos fisicoquímico y a procesos evolutivos en moléculas de interés. Articula diferentes proyectos que tienen en común el hecho de utilizar simulaciones, cálculos y algoritmos computacionales para estudiar sistemas de interés fisicoquímico y biológico. Muchos de sus proyectos apuntan a contestar preguntas similares, aunque desde perspectivas distintas y complementarias. Esta complementariedad temática queda manifiesta además en la variedad disciplinar de los integrantes del programa, que reúne bioquímicos, químicos, físicos y biotecnólogos. El programa lleva más de 10 años de ejecución y atañe a distintas áreas del conocimiento: fisicoquímica, biofísica, evolución y bioinformática. En la actualidad el programa consta de tres grandes líneas de investigación. Una concierne a los estudios de fotodinámica de moléculas orgánicas conjugadas. Una segunda línea de estudio implica el análisis de dinámica molecular de proteínas fundamentada en el estudio del impacto de mutaciones en la diversidad conformacional de una proteína afectando distintos aspectos que atañen a la relación estructura-dinámica-función: unión al ligando, flexibilidad de cavidades, multiplicidad por ligandos, promiscuidad, estabilidad estructural y alteración de mecanismos de transferencia intramolecular de energía. Finalmente, otra línea de estudio en el programa concierne al área de bioinformática estructural de proteínas centrada en el estudio de la diversidad conformacional de las proteínas. Con este término nos referimos a las diferencias estructurales que definen los distintos conformeros que representan el estado nativo de la proteína. Bajo esta línea se propone extender el conocimiento sobre el efecto de la diversidad conformacional en cuanto a la divergencia secuencial y su relación con la función biológica incluyendo también proteínas desordenadas. Así mismo, estudiamos los condicionamientos estructurales a la divergencia secuencial durante la evolución de proteínas. Finalmente, proponemos estudiar los determinantes estructurales de mutaciones asociadas a enfermedades, desde una perspectiva evolutiva, estructural y energética.

Unidad Académica: Departamento de Ciencia y Tecnología.