



Propuesta de Prácticas Curriculares

Título de las prácticas:

Modelado computacional de receptores de la inmunidad innata y diseño de fármacos.

Requisitos: (indicar titulación y curso); otros requisitos adicionales (idiomas, informática, otros conocimientos, etc).

Estudiante de Biotecnología, rama Computacional. Requisitos: inglés nivel medio.

Proyecto formativo

El objetivo fundamental de la Práctica Externa es guiar al alumno para que aplique en el mundo real sus conocimientos, destrezas y habilidades, en un entorno de trabajo en grupo, que reproduzca las condiciones que se pueden encontrar en su futuro lugar de trabajo. Las funciones y tareas a desarrollar en la Práctica permitirán ayudar al alumno a desarrollar sus competencias profesionales desde tres dimensiones: competencias técnicas (conocimientos técnicos propios de la titulación); competencias personales (comportamientos, comunicación, sentido de responsabilidad, compromiso y motivación, creatividad e iniciativa, implicación, trabajo en equipo) y competencias contextuales (capacidad de adaptación al contexto profesional)

Módulo TRABAJO FIN DE GRADO. El objetivo fundamental del TFG es la realización de un trabajo académico que demuestre que el alumno es capaz de aplicar los conocimientos y competencias que ha adquirido a lo largo de la carrera para tratar de resolver un problema, aprovechar una oportunidad o satisfacer una necesidad, de similar naturaleza y complejidad a los que pueda desarrollar en el ejercicio de su actividad profesional, eligiendo una solución que sea viable, tanto desde un punto de vista técnico como económico.

El estudiante se integrará en el grupo de investigación de “Química Biológica Computacional” (dirigido por la Dra. Sonsoles Martín Santamaría) y desarrollará unas tareas enmarcadas dentro de los proyectos de investigación activos en nuestro grupo y con financiación competitiva (Plan Nacional del MINECO PID2020-113588RB-I00 y CSIC-COV19-082/Fondo RECUPERA “Generación de diversidad química” SGL2103050. Los objetivos concretos consisten en aprender y emplear técnicas de modelado molecular (cálculos de mecánica cuántica, análisis conformacional, docking, simulación de dinámica molecular) para abordar problema de reconocimiento molecular y de diseño de moléculas moduladoras de receptores de la inmunidad innata. Además, el estudiante participará en las reuniones de grupo, donde tendrá que exponer sus resultados, y en la vida del CIB, pudiendo asistir a los seminarios y actividades que se organicen.

Las tareas incluirán

El alumno llevará a cabo las siguientes funciones:



- preparar quimiotecas de compuestos para llevar a cabo cribados virtuales. Esto implica: construcción en 3D de cada molécula, optimización de la geometría y cálculo de cargas parciales, estudios conformacionales y de propiedades físico-químicas.
- preparar macromoléculas objeto de estudio: a partir de estructuras cristalográficas o de modelado por homología.
- estudios del modo de unión de moléculas pequeñas a las dianas farmacológicas
- estudios del comportamiento dinámico de las macromoléculas y de los posibles complejos con ligandos por simulación de dinámica molecular
- diseño de nuevo moduladores

Actividades a desarrollar en la práctica académica:

1- Modelado computacional de glicomiméticos para el estudio de su modo de unión a receptores del sistema inmune como lectinas y sistema del complemento. Se pretende entender e identificar las interacciones ligando-receptor que son clave para el reconocimiento molecular. Esta información es crucial para diseñar nuevas moléculas que serán sintetizadas (en colaboración con otros grupos) y estudiadas biológicamente.

2- Modelado computacional de los receptores Toll-like para el estudio de su unión a ligandos (con estructura de tipo glicolípido y otros esqueletos químicos) y proteínas reguladoras. Se pretende avanzar en el conocimiento del mecanismo de acción de esta diana terapéutica para la identificación de moduladores.

Nº de plazas:	1
Fecha de inicio:	01-02-2023
Fecha de fin:	30-06-2024
Horas semanales:	25 o 35 h máximo para Grado y Máster respectivamente
Horario jornada laboral:	09:00-17:00 (flexible)
Importe Ayuda/Bolsa de estudio:	0 €/mes
Tutor académico:	



POLITÉCNICA



E.T.S. DE INGENIERÍA AGRONÓMICA,
ALIMENTARIA Y DE BIOSISTEMAS

Email:	
Departamento tutor académico:	
Tutor empresa:	Sonsoles Martín Santamaría
Email tutor empresa:	smsantamaria@cib.csic.es
Departamento tutor empresa:	Biología Estructural y Química
ENTIDAD COLABORADORA:	Centro de Investigaciones Biológicas Margarita Salas, CSIC C/ Ramiro de Maeztu, 9. 28040-Madrid
<i>A cumplimentar por Oficina Prácticas:</i> Créditos a reconocer (Nº ECTS):	

Enviar por email a: paebiotec.etsiab@upm.es