



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
PROGRAMA DE
MAESTRIA Y DOCTORADO EN CIENCIAS QUIMICAS



Programa de actividad académica

Denominación: CRISTALOGRAFÍA DE PROTEÍNAS					
Clave:	Semestre:	Campo de conocimiento: Química			No. Créditos: 6
Carácter: Optativa de elección			Horas por semana	Total horas/semana	Total horas/semestre
Tipo: Teórico-práctico			Teoría:	Práctica:	5
			2.5	2.5	
Modalidad: CURSO			Duración del programa: 16 semanas		

Actividad académica con seriación antecedente:
Objetivo general: Analizar los principios básicos de la cristalografía de proteínas
Objetivos específicos: 1) Conocer los conceptos teóricos fundamentales de la cristalografía de macromoléculas. 2) Conocer las técnicas más modernas para la obtención de cristales y la resolución de estructuras por técnicas de difracción de rayos X. 3) Realizar el análisis detallado de estructuras cristalográficas.

Índice temático			
Unidad	Tema	Horas	
		Teóricas	Prácticas
1	Introducción. <ul style="list-style-type: none"> Métodos para determinar estructuras 3D Cristalografía, pasado, presente y futuro Aplicaciones de la cristalografía 	2.5	
2	Principios de la cristalografía de proteínas <ul style="list-style-type: none"> Bases de la difracción de rayos X Espacio recíproco La esfera de Ewald Simetría y grupos espaciales 	7.5	
3	Modelos estructurales <ul style="list-style-type: none"> Propiedades conformacionales de las cadenas polipeptídicas Estructuras secundaria, terciaria y cuaternaria Interacciones físicas que determinan las propiedades de las proteínas 	5.0	
4	Cristalización <ul style="list-style-type: none"> Cristalización de proteínas. Diagramas de fase y métodos. Factores que afectan el crecimiento y la calidad de los cristales Métodos para optimizar la calidad de los cristales 	5.0	2.5
5	Colecta de datos <ul style="list-style-type: none"> Estrategia de colecta Visita al Laboratorio Nacional de Estructura de Macromoléculas (LANEM) 	5.0	2.5

	<ul style="list-style-type: none"> • Reducción de datos 		
6	Caracterización de los datos <ul style="list-style-type: none"> • Escalamiento de datos • Análisis de la calidad de los datos • Patologías en los datos <ul style="list-style-type: none"> -Superposición de redes -Anisotropía • Programas utilizados en el escalamiento de datos XDS, Mosflm, HKL3000 	5.0	2.5
7	El problema de la fase <ul style="list-style-type: none"> • Reemplazo molecular • Dispersión anómala • Procedimientos para mejorar las fases • Obtención del modelo inicial 	7.5	5.0
8	Afinamiento de la estructura <ul style="list-style-type: none"> • Fundamentos y metodologías • Programas utilizados para la obtención de fases y afinamiento de estructuras. <ul style="list-style-type: none"> PHENIX CCP4 COOT • Flexibilidad molecular y parámetros de movilidad atómica 	7.5	5.0
9	Validación y análisis de estructura <ul style="list-style-type: none"> • Programa MolProbity, Gráfica de Ramachandran. • Factor B • Accesibilidad al disolvente • Contactos inter e intramoleculares • Superficie electrostática • Cavidades • Hidrofobicidad • Empaquetamiento 	2.5	
10	Análisis y discusión de artículos	10	
11	Examen final	2.5	
Total de horas teóricas:		60	
Total de horas prácticas:		15	
Suma total de horas:		75	

Bibliografía básica :

Principles of Protein X-Ray Crystallography, Drenth, J., Springer-Verlag 3a edición (2006)

Crystallography Made Crystal Clear: A Guide for Users of Macromolecular Models
Gale Rodhes. Academic Press 2a edición (2000)

Protein crystallography, Blundell, T.L. and Johnson, L.N. Academic press (1976)

Fundamentals of Crystallography, Giacovazzo, C., Monaco, H. L., Viterbo, D. and Scordari, F.
International Union of Crystallography Book Series, No. 2 (1994)

Practical protein crystallography, McRee, D.E., Academic Press (1993)

Protein crystallization. Techniques, Strategies and tips, Bergfors, T.M. (Ed)
International University Line (2001)

Crystallization of Nucleic Acids and Proteins: A Practical Approach Ducruix, A. and Giege, R. (Eds), Oxford University Press; 2a edición (1999)	
Proteins. Structures and molecular properties, Creighton, T.E., W.H. Freeman and company 2a edición	
Introduction to protein structure, Branden, C. and Tooze, J., Garland publishing Inc (1999)	
Bibliografía complementaria: En cada tema se proporcionará bibliografía específica	
Sugerencias didácticas:	Mecanismos de evaluación del aprendizaje de los alumnos:
Exposición oral (X)	Exámenes parciales ()
Exposición audiovisual (X)	Examen final escrito (X)
Ejercicios dentro de clase (X)	Trabajos y tareas fuera del aula (X)
Ejercicios fuera del aula (X)	Exposición de seminarios por los alumnos (X)
Seminarios ()	Participación en clase (X)
Lecturas obligatorias (X)	Asistencia (X)
Trabajo de investigación (X)	Seminario ()
Prácticas de taller o laboratorio ()	Otras: ()
Prácticas de campo ()	
Otras: _____ ()	