Plan de Gestión de Datos

INFORMACION SOBRE EL PROYECTO

1. – Titulo del Proyecto

- Titulo del Proyecto (en castellano)

Estudio de propiedades fisicoquímicas de biomoléculas y sistemas biomiméticos mediante técnicas de Modelado Molecular

- Titulo del Proyecto (en ingles)

Study of physicochemical properties of biomolecules and biomimetic systems using Molecular Modeling techniques.

-Descripción del Proyecto (en castellano) Resumen

El proyecto se propone estudiar moléculas y sistemas biológicos de interés básico y aplicado, empleando tanto herramientas Bioinformáticas como Simulaciones Computacionales. En particular, se continuará con el estudio del gen RA1, el cual es un Factor de transcripción que controla el destino y la identidad del meristemo en gramineas. En particular se analizará el impacto estructural/conformacional de la supresión del residuo K53 en la zona del ZF (Zinc Finger) de RA1 y se intentará predecir a partir de las simulaciones de Dinámica Molecular los residuos que potencialmente podrían ser determinantes de la unión específica al ADN. De la misma manera se continaurá trabajando en el modelado de Interferon beta a1 y dos variantes mutadas (tanto glicosiladas como sin glicosilar) que le otorgan menos inmunogenicidad y similar actividad, con el objetivo de racionalizar la interacción con su receptor específico. Por otra parte se proyecta seguir con los estudios de las interacciones de dos anfifilos de interés biotecnológico: el detergente CHAPS y los compuestos Gémini Peptídicos, los cuales se estudiarán mediante Dinámica Molecular. Para el caso del detergente CHAPS se estudiará la interacción con proteínas de diferentes características fisicoquímicas, con el objetivo de comprender a nivel molecular cómo esta molécula facilita la extracción de proteínas de membrana. En el caso de los compuestos Gémini Peptídicos se estudiarán las interacciones entre dicho compuesto con moléculas de ADN, con el objetivo de caracterizar tanto las primeras etapas de su agregación en fase acuosa, como la unión a ADN. Se estudiará además el compuesto lipofectamina el cual representa el estándar de oro en los procesos de transfección de moléculas de ADN. Finalmente se propone identificar posibles mutaciones en la proteína gB (proteína viral que media la entrada del virus dentro huésped) de los virus Epstein-Barr y KSHV (Virus Herpes del Sarcoma de Kaposi) que estabilicen su estructura en una conformación pre-fusión, para así mejorar su inmunogenicidad y capacidad de generación de anticuerpos neutralizantes con fines vacunales. A su vez, dado que las estructuras de las proteínas gB en su estructura pre-fusión de EBV y KSHV aún no han sido resueltas en forma experimental, su obtención permitiría resolver su estructura experimentalmente.

-Descripción del Proyecto (en ingles) Resumen

The project aims to study molecules and biological systems of basic and applied interest, using both Bioinformatics tools and Computational Simulations. Specifically, the study of the RA1 gene, a transcription factor that controls the fate and identity of the meristem in grasses, will continue. The structural/conformational impact of the suppression of residue K53 in the Zinc Finger (ZF) region of RA1 will be analyzed, and Molecular Dynamics simulations will be used to predict residues that could potentially be determinants of specific DNA binding.
Similarly, work will continue on modeling Interferon beta a1 and two mutated variants (both glycosylated and non-glycosylated) that confer lower immunogenicity and similar activity, with the goal

of rationalizing the interaction with its specific receptor. Additionally, studies will continue on the interactions of two amphiphiles of biotechnological interest: the detergent CHAPS and Gemini Peptidic compounds, which will be studied through Molecular Dynamics.
For the CHAPS detergent, interactions with proteins of different physicochemical characteristics will be studied to understand at the molecular level how this molecule facilitates the extraction of membrane proteins. For the Gemini Peptidic compounds, interactions with DNA molecules will be studied to characterize both the early stages of their aggregation in aqueous phase and their binding to DNA. Furthermore, the lipofectamine compound, the gold standard in the transfection processes of DNA molecules, will be studied.
Finally, the project proposes to identify possible mutations in the gB protein (a viral protein that mediates virus entry into the host) of Epstein-Barr virus and KSHV (Kaposi's Sarcoma Herpesvirus) that stabilize its structure in a pre-fusion conformation. This would improve its immunogenicity and the generation of neutralizing antibodies for vaccine purposes. Moreover, since the structures of the pre-fusion gB proteins of EBV and KSHV have not yet been experimentally resolved, obtaining these structures would allow for their experimental determination.

-Palabras Clave descriptivas del Proyecto (en castellano)

Modelado Molecular, Detergentes, gémini peptídicos, CHAPS, Interferon beta, Dedos de Zinc, Estabilización de Estados Proteicos Intermediarios.

- Palabras Clave descriptivas del Proyecto (en ingles)

Molecular Modeling, Detergents, Peptide Gemini, CHAPS, Interferon beta, Zinc Fingers, Stabilization of Intermediate Protein States.

2 – Datos del Director/ar del Proyecto

- Nombre y Apellido: A. Sergio Garay

- Unidad Académica: Facultad de Bioquímica y Cs. Biológicas

- Teléfono oficial de contacto: +543425030945

-Teléfono movil de contacto:+543425030945

-E-mail del Director/a del Proyecto: sergio.alberto.garay@gmail.com

DATOS RESULTANTES DE LA EJECUCIÓN DEL PROYECTO

-Describa la toma de muestras / datos a realizar

Los datos son extraídos de simulaciones computacionales y/o de servidores que producen predicciones de diferente índole.

– Datos: ¿Existe alguna razón por la cual los datos declarados no deban ser puestos a disposición de la comunidad / ser de acceso público? (marque X)

	NO
	SI. Elija una de las opciones:
a)	se encuentra en evaluación de protección por medio de patentes **(X)**
b)	no se inició el proceso de evaluación de patentabilidad, pero podría ser protegible
c)	existe un contrato con un tercero que impide la divulgación
d)	Otro. Justifique.
– Período de Confidencialidad: Es el periodo durante el cual los datos no deberían ser publicados, contado a partir del momento de la toma de los mismos. El periodo máximo para la no publicación es de 5 (CINCO) años posteriores a su obtención. Luego de este periodo, los datos estarán disponibles para la comunidad / serán de acceso público. **Si Ud. considera que este tiempo es insuficiente, y necesita prorrogar el período de confidencialidad, indique sus motivos y la cantidad de años adicionales que considera necesarios. Marque su opción con "X".**	
	1 (UN) año
	2 (DOS) años
	3 (TRES) años
	4 (CUATRO) año
	5 (CINCO) años (X)
	Otro.
	Motivos: