



Red
Estructura
Función y
Evolución de
Proteínas



DAY 1 (10.10.16):

Rosetta principles

Setting up the software

Tutorial: How to build ligands into Rosetta

Kinematics

- fragment-based structural sampling
- rotamers

Energy calculations

- score functions
- structural restraints

Tutorial: Simple RosettaScripts

Concepts of Movers/Filters

DAY 2 (10.11.16):

Homology modeling and Structure prediction

Tutorial: Homology modeling

Bioinformatics tools

- Comparison matrices
- Databases

Tutorial: Gremlin models for ab initio structural prediction

Gremlin method

DAY 3 (10.12.16):

Computational Protein Design

Tutorial: Protein-protein Docking with RosettaScripts

RosettaRemodel

- domain insertion
- disulfide building
- de novo structure design
- ligands
- symmetry

Tutorial: Protein design with RosettaRemodel

DAY 4 (10.14.16):

Discussion: Questions and Answers

Working in your own project

Discuss of your own projects

Closing remarks

****Inscripciones: Cupo máximo 20 alumnos, se realizará una selección sobre un resumen de nos mas de 250 palabras de la importancia del uso Rosetta en sus investigaciones. También se requiere Uso básico del programa Rosetta.***

Para el curso firmar la licencia académica del programa Rosetta.

Enviar correo con sus datos personales, resumen al Dr. Alejandro Sosa a: asosa@unam.mx, a mas tardar el 30 de Septiembre.