

Instituto de Investigación en Biomedicina de Buenos Aires
CONICET - Instituto Partner de la Sociedad Max Planck

Temas de Tesis de Licenciatura y Doctorado Presentación a Beca Doctoral CONICET

Se ofrece la posibilidad de realizar trabajos de tesis de Licenciatura y Doctorado en el grupo de “Química Computacional y Diseño de Fármacos” del Instituto de Investigación en Biomedicina de Buenos Aires - Instituto Partner de la Sociedad Max Planck (IBioBA-MPSP).

Las posibles áreas de trabajo son:

1. Diseño de fármacos líderes asistido por computadora en colaboración con grupos experimentales.
2. Desarrollo de nuevas metodologías para el estudio de la interacción ligando-proteína.
3. Simulaciones en sistemas biomoleculares que permitan explicar la relación entre estructura, dinámica y función.

Publicaciones representativas de los últimos años:

1. Forti, F. et al. A multilevel strategy for the exploration of the conformational flexibility of small molecules. J. Chem. Theory Comput. 8:1808, 2012.
2. Cavasotto, C.N. Normal-mode-based approaches in receptor ensemble docking. Methods Mol. Biol. 819:157, 2012.
3. Anisimov, V.M. & Cavasotto, C.N. Quantum Mechanical Binding Free-energy Calculation for Phosphopeptide Inhibitors of the Lck SH2 Domain. J. Comput. Chem. 32:2254, 2011.
4. Anisimov, V.M. & Cavasotto, C.N. Hydration free energies using semiempirical quantum mechanical Hamiltonians and a continuum solvent model with multiple atomic-type parameters. J. Phys. Chem. B 115:7896, 2011.
5. Echenique P. et al. The canonical equilibrium of constrained molecular models. Eur. Phys. J. ST, 200:5, 2011.
6. Phatak, S.S. et al. Ligand-steered modeling and docking: A benchmarking study in Class A G-Protein Coupled Receptors, J. Chem. Inf. Model. 50:2119, 2010.
7. Anisimov, V.M. et al. Quantum mechanical dynamics of charge transfer in ubiquitin in aqueous solution. ChemPhysChem 10:3194, 2009.
8. Bisson, W.H et al. Molecular Basis of Agonicity and Antagonicity in the Androgen Receptor Studied by Molecular Dynamics Simulations. J. Mol. Graph. Mod. 27:452, 2008.

Los Institutos pertenecientes a la Sociedad Max Planck son institutos de investigación en ciencia básica al servicio de la comunidad. El IBioBA-MPSP, recientemente inaugurado, contribuirá al desarrollo de las ciencias biomédicas en Argentina con la finalidad de interconectar la ciencia básica con la aplicada y así traducir la información científica en desarrollo tecnológico. El IBioBA-MPSP funciona dentro del Polo Científico Tecnológico de Buenos Aires.

Para más detalles, contactar al Dr. Claudio Cavasotto, ccavasotto@ibioba-mpsp-conicet.gov.ar

