

Laboratorio de Cómputo científico (502 L), Facultad de Ciencias Naturales, Universidad Icesi, septiembre 10-12 de 2019.

## CURSO TEÓRICO-PRÁCTICO DE ENZIMOLOGÍA COMPUTACIONAL

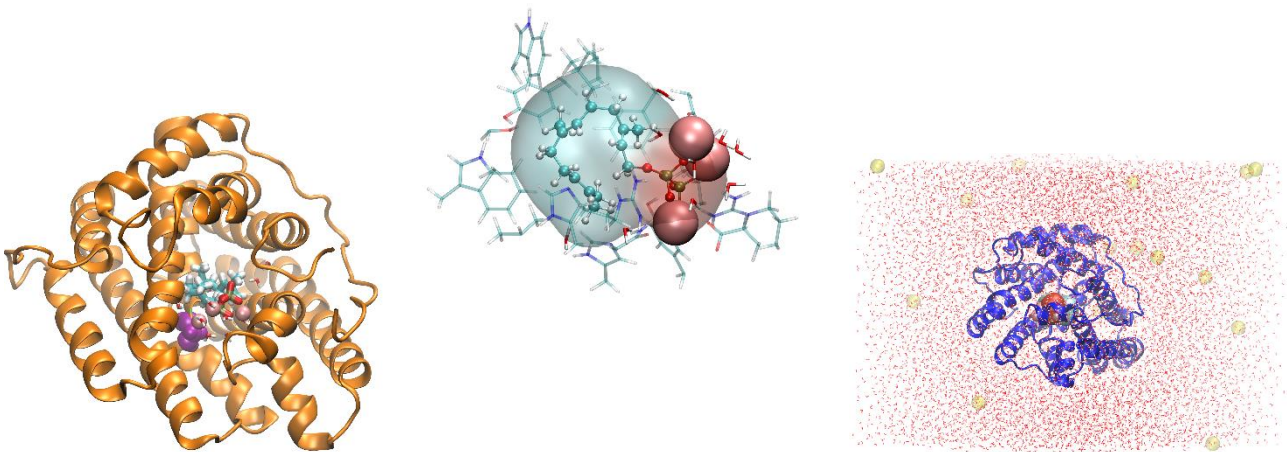
**Dr. Andrés M. Escorcía**

School of Biochemistry, University of Bristol, United Kingdom

[andres.escorciacabrera@bristol.ac.uk](mailto:andres.escorciacabrera@bristol.ac.uk)

La enzimología computacional es la disciplina que se encarga del estudio de las reacciones enzimáticas mediante métodos computacionales. Esta permite obtener información acerca de las bases moleculares de las propiedades catalíticas de las enzimas (actividad, especificidad, selectividad, etc.) con un nivel de detalle que no es accesible experimentalmente. En general, el propósito de esta disciplina es proveer un conocimiento detallado de cómo funcionan las enzimas y brindar información que pueda ser utilizada para modificar sus propiedades con precisión. Es así como la enzimología computacional constituye una herramienta valiosa para la interpretación de resultados experimentales, diseño de nuevos biocatalizadores, desarrollo de fármacos, entre otros.

El presente curso está dirigido a principiantes interesados en este campo. El objetivo del mismo es brindar un contexto general sobre los aspectos teóricos (conceptos) y prácticos (cómo proceder en la práctica) de diversos métodos utilizados frecuentemente en el estudio computacional de reacciones enzimáticas. Se abordará el modelado molecular de complejos enzima-ligando mediante simulaciones de acoplamiento molecular y dinámica molecular. Igualmente, se abarcará el cálculo de perfiles de reacción utilizando métodos híbridos de mecánica cuántica/mecánica molecular.



## CONTENIDO GENERAL DEL CURSO

Fecha	Hora	Actividad
Martes, 10 de septiembre	09:00-13:00	Charla: Aspectos Teóricos y Prácticos de Enzimología Computacional  Taller 1: Visualización de la estructura de complejos enzima-ligando. [Inscripción requerida, cupos limitados]
Miércoles, 11 de septiembre	14:00-17:00	Taller 2: Modelado de complejos enzima-ligando mediante acoplamiento molecular. [Inscripción requerida, cupos limitados]
Jueves, 12 de septiembre	14:00-18:00	Taller 3: Cálculo de perfiles/rutas de reacción mediante métodos híbridos de mecánica cuántica/mecánica molecular. [Inscripción requerida, cupos limitados]

Andrés Escorcía hizo pregrado en química de la Universidad Industrial de Santander (UIS), su trabajo de grado fue dirigido por los profesores Rodrigo Torres y Claudia Ortiz. Después de terminar su pregrado trabajo en el Laboratorio de Físicoquímica de Corporación para la Investigación de la Corrosión en Piedecuesta, Santander; y enseñando en la UIS. Bajo la dirección de Marcus Doerr y Martha Daza, Andrés Escorcía obtuvo su doctorado con disertación "*Enantioselective and chemoselective acylation of (R,S)-propranolol catalyzed by *Candida antarctica* lipase B: A theoretical and experimental approach*". Durante su doctorado, Andrés realizó una pasantía en el grupo del profesor Walter Thiel en el Max-Planck-Institut für Kohlenforschung, en Mülheim an der Ruhr, Alemania. El Doctor Escorcía ha realizado estancias post-doctorales en los Institutos Max Planck de Mülheim an der Ruhr y Magdeburg bajo las direcciones de Walter Thiel y Matthias Stein. Actualmente trabaja como asociado postdoctoral en el grupo de Marc van der Kamp en la escuela de bioquímica de la facultad de ciencias biomédicas de la Universidad de Bristol en Reino Unido, don investiga sobre el papel de una segunda capa de coordinación de arginina en hidrogenasas-[NiFe].



Mayor información: Carlos A. Arango [caarango@icesi.edu.co](mailto:caarango@icesi.edu.co)