

Curso Práctico de Identificación de Proteínas con Datos de Espectrometría de Masas: Herramientas Bioinformáticas

LUNES 20

Mañana

- 9:30** Entrega de documentación.
- 09:45-10:00** Presentación del curso.
- 10:00-10:45** Identificación de proteínas por mapeo peptídico.
Dr. Samuel Ogueta. Centro del Cáncer. Salamanca.
- 10:45-11:15** Pausa.
- 11:45-14:00** Sesión práctica de manejo de programas de búsqueda con espectros de MALDI-TO. Mascot.
- 14:00-15:30** Comida.

Tarde

- 15:30-16:15** Mecanismos de fragmentación de péptidos.
Dr. Benito Cañas. Dpto. Química Analítica-UCM.
- 16:15-17:15** Secuenciación *denovo* de espectros de fragmentación de péptidos.
Dra. Michaela Scigelova. Thermo Electrón.
- 17:15-17:45** Pausa.
- 17:45-20:30** Sesión práctica de secuenciación de novo. Reparto de tareas

MARTES 21

Mañana

- 9:30-10:30** Revisión de las tareas. Motores de búsqueda con datos de fragmentación de péptidos. Interpretación de resultados.
Dra. Michaela Scigelova.
- 10:30-11:00** Pausa.
- 11:00-14:00** Sesión práctica de manejo de motores de búsqueda (SEQUEST) con espectros de fragmentación de péptidos.
- 14:00-15:30** Comida.

Tarde

- 15:30-16:30** Programas para la secuenciación *de novo* automática.
Dr. Jesús Vázquez. CBMSO-UAM.
- 16:30-17:30** Proteómica de "high-throughput". Análisis de datos.
Daniel López. CBMSO-UAM.

Todas las sesiones prácticas serán tuteladas por los profesores del curso

Dr. Samuel Ogueta
Dr. Benito Canas

D. Daniel López
Dra. Michaela Scigelova

CURSO PRÁCTICO

DE IDENTIFICACIÓN DE PROTEÍNAS CON DATOS DE ESPECTROMETRÍA DE MASAS: HERRAMIENTAS BIOINFORMÁTICAS

Córdoba, 20 y 21 de Diciembre de 2004



UNIVERSIDAD DE CORDOBA

ORGANIZADO POR:

Departamento de Bioquímica y Biología Molecular

S.C.A.I.

Sociedad Española de Proteómica

CON LA COLABORACIÓN DE:

Departamento de Química Analítica. F. de Químicas
Universidad Complutense de Madrid

Laboratorio y Servicio de Química de Proteínas y
Proteómica Centro de Biología Molecular (CSIC)

Thermo
ELECTRON CORPORATION

PRESENTACIÓN

La **SEProt** nace con el objetivo de impulsar el desarrollo de la Proteómica en nuestro país, agrupando para ello a investigadores del campo de la Proteómica, usuarios de servicios de Proteómica, empresas del sector, y estudiantes interesados en el estudio de la metodología empleada en este campo. Uno de sus principales objetivos consiste en impulsar, fomentar y optimizar la utilización de las diversas técnicas que se utilizan en Proteómica, entre las que se encuentra sin lugar a dudas la espectrometría de masas.

La espectrometría de masas en tándem es una de las técnicas más usadas en la actualidad en el campo de la proteómica. Esta técnica permite una identificación muy rápida, sistemática y sensible de péptidos y proteínas, así como la caracterización fina de las estructuras primaria y secundaria de las éstas, incluyendo las modificaciones postraduccionales, y está siendo aplicada en numerosas áreas de la investigación biomédica. Uno de los aspectos más críticos de esta técnica es la interpretación de la información obtenida. Este curso pretende que los asistentes adquieran soltura y experiencia en la interpretación de los espectros de fragmentación de péptidos obtenidos mediante espectrometría de masa en tándem. Este primer curso de la SEProt se enmarca dentro de las actividades que la sociedad lleva a cabo para cumplir sus objetivos.

INTRODUCCIÓN Y OBJETIVOS DEL CURSO

La proteómica actual está basada en la identificación de proteínas por espectrometría de masas. Para esto, los péptidos provenientes de un digerido proteico se analizan mediante cromatografía líquida acoplada a espectrometría de masas en tándem, obteniéndose sus espectros de fragmentación, que posteriormente se analizan utilizando motores de búsqueda (MASCOT y SEQUEST son los más utilizados). Estos motores producen espectros teóricos a partir de las secuencias de proteínas que se encuentran en las bases de datos y los correlacionan con los espectros obtenidos experimentalmente en el espectrómetro de masas. Teóricamente esta metodología debería permitir la identificación automática de proteínas. Sin embargo hasta la fecha no existen motores de búsqueda que ofrezcan una seguridad absoluta en las asignaciones de secuencias de péptidos. Al no generar un límite claro entre las asignaciones correctas y las que no lo son, estos programas de búsqueda producen con cierta frecuencia tanto falsos positivos como falsos negativos. Por esto es necesario efectuar una revisión manual de las asignaciones por parte de un experto. Uno de los objetivos de este curso es que el alumno adquiera los conocimientos apropiados sobre la fragmentación de péptidos y el uso de programas de búsqueda como para saber discernir entre las asignaciones correctas e incorrectas.

Una segunda deficiencia que presentan estos programas de búsqueda es inherente a la manera en que funcionan. Dado que los resultados se obtienen por comparación entre datos experimentales y los que se pueden deducir de la información contenida en las bases de datos de proteínas, no son capaces de asignar secuencias a espectros de fragmentación de péptidos cuando la proteína de la que proceden no se encuentra en la base de datos. Variaciones en la secuencia como mutaciones o modificaciones postraduccionales producen el mismo efecto. En estos casos el experto ha de tener los conocimientos apropiados para enfrentarse al espectro y extraer de él la máxima información posible, esto es, la secuencia del péptido del que procede con el objeto de sintetizar sondas para clonar el gen correspondiente. Este procedimiento se denomina secuencia de novo, y consiste en la utilización de los datos producidos por espectrometría de masas para ensamblar la secuencia de un péptido. Para realizar esta labor son necesarios un conocimiento de los mecanismos de fragmentación de los péptidos además de cierta experiencia en esta labor. El segundo objetivo de este curso es conseguir que el alumno se familiarice con la interpretación manual de los espectros de fragmentación de péptidos.

INFORMACIÓN GENERAL

Diploma: A todos los asistentes que sigan con asiduidad y aprovechamiento el curso, se les entregará un diploma acreditativo.

Lugar: Aula de Informática. Edificio Ramón y Cajal.

Cuotas de inscripción:

Miembros de la Sociedad 125 euros.

No miembros 160 euros.

La inscripción al curso incluye la cuota de miembro de la sociedad hasta final del año 2005.

Plazas limitadas.

Se darán un número de becas de reembolso total o parcial de la cuota de inscripción.

Forma de pago: Trásele a la cuenta de la Sociedad de Proteómica, indicando: CURSO DE PROTEÓMICA

LA CAIXA nº 2100 0880 31 0200327385

C/ Guillermo Tell 28-30

08006 BARCELONA.

Inscripción por correo electrónico: *Prof. Jesús V. Jorriñ Novo* bf1jonoj@uco.es

Para más información contactar con:

Jesús V. Jorriñ Novo - bf1jonoj@uco.es - 957 21 85 74