



Propuesta de Trabajo Fin de Máster

Año académico 2026-2027

MÁSTER EN CIENCIA DE DATOS PARA CIENCIAS EXPERIMENTALES

Proyecto Nº 40

Título: Polímeros codificados genéticamente: diseño de un modelo de traducción de polímeros sintéticos a secuencias de aminoácidos basado en propiedades fisicoquímicas

Departamento/ Laboratorio: Química

Director: Juan Pablo Fuenzalida Werner

Correo electrónico: jfuenzalidaw@unav.es

Codirector:

Correo electrónico:

Resumen:

Los polímeros sintéticos ofrecen un espacio de propiedades amplio pero no son codificables genéticamente, mientras que las proteínas son programables a nivel de secuencia pero carecen de un mapa sistemático que relacione su composición con el comportamiento macroscópico de un polímero. Este trabajo propone construir ese mapa. En una primera fase se desarrollará una base de datos curada de polímeros clasificados por su solubilidad en etanol, en agua, y en mezclas agua-etanol, excluyendo explícitamente los casos de solubilidad parcial. Cada entrada se describirá mediante el SMILES de su unidad repetitiva, con descriptores calculados a nivel de monómero (masa molecular, donores y aceptores de enlace de hidrógeno, logP, refracción molar, polarizabilidad y momento dipolar) y descriptores del polímero independientes del peso molecular, en particular los parámetros de solubilidad de Hansen (δ_d , δ_p , δ_h) estimados por contribución de grupos (Hofstetter–Van Krevelen y Fedors), junto con las distancias de solubilidad a cada disolvente. En una segunda fase, los veinte aminoácidos proteinogénicos se caracterizarán en el mismo espacio de descriptores, lo que permitirá definir una métrica de equivalencia residuo–monómero. Sobre esta base se diseñará un modelo capaz de proponer secuencias de aminoácidos cuyo perfil fisicoquímico agregado reproduzca el de un polímero sintético dado. Las secuencias candidatas se evaluarán computacionalmente en términos de solubilidad predicha y de plegamiento, con el fin de establecer los criterios de selección para una futura validación experimental.

OPTATIVAS RECOMENDADAS

- 1.
- 2.
- 3.
- 4.