



Propuesta de Trabajo Fin de Máster

Año académico 2026-2027

MÁSTER EN CIENCIA DE DATOS PARA CIENCIAS EXPERIMENTALES

Proyecto Nº41

Título: Desarrollo de una metodología de predicción estructural para la evaluación computacional de diseños experimentales de sensores ambientales basados en proteínas fluorescentes circularmente permutadas

Departamento/ Laboratorio: Química

Director: Juan Pablo Fuenzalida Werner

Correo electrónico: jfuenzalidaw@unav.es

Codirector:

Correo electrónico:

Resumen:

Los sensores ambientales basados en proteínas fluorescentes circularmente permutadas acoplan el reconocimiento de un analito a un cambio conformacional que modula la emisión del cromóforo. Aunque el dominio de unión puede optimizarse computacionalmente con relativa fiabilidad, la optimización de la respuesta fluorescente sigue siendo un problema abierto: el rendimiento del sensor depende del sitio de permutación, de la longitud y composición de los conectores y del acoplamiento alostérico entre el dominio sensor y el barril β , variables que definen diseños experimentales alternativos de un mismo sensor. El principal obstáculo metodológico es que los predictores de estructura actuales tienden a converger hacia una única conformación y a generar modelos prácticamente indistinguibles en presencia y ausencia de ligando, pese a que los estados correspondientes son estructuralmente divergentes en el plano experimental. Este trabajo propone desarrollar y validar una metodología capaz de recuperar dicha distinción. Se evaluarán de forma sistemática distintas estrategias de perturbación estructural orientadas a generar conjuntos conformacionales en lugar de modelos únicos, junto con criterios de evaluación energética y de estabilidad relativa entre los estados con y sin ligando. La metodología se contrastará con un conjunto de sensores de comportamiento experimental conocido, con el objetivo de establecer qué descriptores computacionales se correlacionan con la respuesta fluorescente medida y, en consecuencia, permiten priorizar diseños antes de su construcción en el laboratorio.

OPTATIVAS RECOMENDADAS

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