



POLITÉCNICA



E.T.S. DE INGENIERÍA AGRONÓMICA,
ALIMENTARIA Y DE BIOSISTEMAS

Título de las prácticas:

Computer aid drug design: Search of novel modulators of TRPM8 channels

Descripción de las funciones del alumno

This work will be center in the search of TRPM8 modulators, in particular, in filtering our in-house collection of derivatives to identify those molecules that, theoretically, are more likely to bind to this channel. TRPM8 is a transmembrane channel involved in cold sensing, and it has been implicated in a series of pathologies as pain, cancer... Within this project, the student will become familiar with TRPM8 channels and the modeling of their three dimensional structure. Another aspect will be the preparation of the small molecules for subsequent molecular modelling studies. Finally, docking studies will be carried out to filter a directed compound library. Docking studies analyzed the potential interaction of small molecules and a biological target, in our studies the TRPM8 channel. Therefore, these studies will allow the selection of a subset of compounds that, theoretically, have more probability to interact with TRPM8. Outside the scope of this proposal, a collaborating group will carry out the biological evaluation.

Requisitos: *(indicar titulación y curso); otros requisitos adicionales (idiomas, informática, otros conocimientos, etc).*

English skills will be a plus.

Proyecto formativo

Módulo PRACTICAS EXTERNAS. El objetivo fundamental de las Prácticas Externas es guiar al alumno para que aplique en el mundo real los conocimientos que ha adquirido previamente en un entorno de trabajo en grupo que reproduzca de una manera realista las condiciones que se puede encontrar en su futuro lugar de trabajo. El estudiante podrá familiarizarse con el mundo laboral (horarios, responsabilidad, actitud, organización, etc), y con la metodología de trabajo adecuada a la realidad profesional, contrastando y aplicando los conocimientos académicos adquiridos.

Módulo TRABAJO FIN DE GRADO/MASTER. El objetivo fundamental del TFG/M es la realización de un trabajo académico que demuestre que el alumno es capaz de aplicar los conocimientos y competencias que ha adquirido a lo largo de la carrera para tratar de resolver un problema,



POLITÉCNICA



E.T.S. DE INGENIERÍA AGRONÓMICA,
ALIMENTARIA Y DE BIOSISTEMAS

aprovechar una oportunidad o satisfacer una necesidad, de similar naturaleza y complejidad a los que pueda desarrollar en el ejercicio de su actividad profesional, eligiendo una solución que sea viable, tanto desde un punto de vista técnico como económico.

Actividades a desarrollar en la práctica académica:

1. Molecular modelling of TRPM8 channels on the base of know 3D structures.
2. Preparation of the compound library to be used in molecular docking studies.
3. Induced-fit-docking studies (IFD) with known TRPM8 ligands, as a preliminary evaluation of the method.
4. IFD studies of an in-house compounds collection.
5. Analysis of the IFD studies to select derivatives for subsequent biological evaluation (by our collaborators).

Nº de plazas:	1
¿El alumno tendrá trato habitual con menores?	NO
Fecha de inicio:	01/10/2021
Fecha de fin:	31/05/2022 (hasta llegar a 280h)
Horas semanales:	20
Horario jornada laboral:	Flexible
Importe Ayuda/Bolsa de estudio:	€/mes
Tutor académico: Email:	
Departamento tutor académico:	
Tutor empresa:	Mercedes Martín Martínez



POLITÉCNICA



E.T.S. DE INGENIERÍA AGRONÓMICA,
ALIMENTARIA Y DE BIOSISTEMAS

Email tutor empresa:	mmartin@igm.csic.es
Departamento tutor empresa:	Departamento de Biomiméticos para el descubrimiento de fármacos.
Ubicación de la estancia de las practicas	Instituto de Química Médica (CSIC)
ENTIDAD COLABORADORA:	CSIC
A cumplimentar por Oficina Prácticas ETSIAAB:	
Créditos a reconocer (Nº ECTS):	