



Plan de Gestión de Datos

INFORMACIÓN SOBRE EL PROYECTO

1. – Datos del Proyecto

- Título del Proyecto (en castellano)

“Estudio de propiedades fisicoquímicas de biomoléculas y sistemas biomiméticos mediante técnicas de Modelado Molecular”

- Título del Proyecto (en inglés)

“Study of chemical physical properties of Biomolecules and Biomimetic Systems using Molecular Modeling Technics”

- Descripción del Proyecto (en castellano) Resumen

El proyecto se propone estudiar moléculas y sistemas biológicos de interés básico y aplicado, empleando tanto herramientas Bioinformáticas como Simulaciones Computacionales. En particular, se continuará con los estudios de sistemas lípidos, tanto micelares como de membranas modelo, línea de trabajo que tiene una larga tradición dentro del grupo de investigación. Estos estudios involucran la caracterización estructural y dinámica de diferentes marcadores de espín (5, 12, 16-SASL y Doxil Colestano). Además se está trabajando en el modelado de Interferones alfa y beta, con el objetivo de caracterizar el efecto de la humanización y de fundamentar la selección de mutantes de menor inmunogenicidad, respectivamente. Por otra parte se están realizando simulaciones de Dinámica Molecular de compuestos gémini peptídicos con el objetivo de caracterizar tanto las primeras etapas de su agregación en fase acuosa, como la unión a ADN.

- Descripción del Proyecto (en inglés) Resumen

The project aims to study molecules and Biological Systems of basic and applied interest, using both Bioinformatics tools and Computational Simulations. In particular, studies on lipid systems, both micellar and model membranes, will continue, a line of work that has a long tradition within the research group. These studies involve the structural and dynamic characterization of different spin markers (5, 12, 16-SASL and Doxil Cholestane). Furthermore, work is being carried out on the modeling of alpha and beta interferons, with the aim of characterizing the effect of humanization and of supporting the selection of less immunogenic mutants, respectively. On the other hand, Molecular Dynamics simulations of gemini peptide compounds are being carried out with the aim of characterizing both the early stages of their aggregation in the aqueous phase, as well as DNA binding.

- Palabras Claves descriptivas del Proyecto (en castellano)

Sistemas Biomiméticos, Membranas Modelo Modelado Molecular

- Palabras Claves descriptivas del Proyecto (en inglés)

Biomimetic Systems Model Membranes Molecular Modeling

2 – Datos del Director/ar del Proyecto

- Nombre y Apellido

Daniel Enrique Rodrigues

- Unidad Académica

Facultad de Bioquímica y Cs. Biológicas

- Teléfono oficial de contacto

+ 54 9 342 4575213

-Teléfono móvil de contacto

+54-342-4-723650

-E-mail del Director/a del Proyecto

dr.daniel.rodrigues@gmail.com



DATOS RESULTANTES DE LA EJECUCIÓN DEL PROYECTO

-Describa la toma de muestras / datos a realizar

Dada las características propias de las simulaciones computacionales, todos los datos son generados a medida que los programas de simulación avanzan en sus procedimientos. Los datos producidos son recogidos en los discos rígidos de las computadoras de nuestro grupo de investigación, en forma de archivos de diferentes formatos (binarios, comprimidos, de texto, gráfico).

- Datos: ¿Existe alguna razón por la cual los datos declarados no deban ser puestos a disposición de la comunidad/ser de acceso público? (marque X)

	SI
	SI. Elija una de las opciones:
	a) Se encuentra en evaluación de protección por medio de patentes b) No se inició el proceso de evaluación de patentabilidad, pero podría ser protegible c) Existe un contrato con un tercero que impide la divulgación d) Otro: Se solicita confidencialidad debido a que los resultados serán parte de una publicación científica en una revista especializada del área, para lo cual es necesario que los datos no hayan sido publicados con anterioridad.
	- Período de Confidencialidad: Es el período durante el cual los datos no deberían ser publicados, contado a partir del momento de la toma de los mismos. El período máximo para la no publicación es de 5 (CINCO) años posteriores a su obtención. Luego de este periodo, los datos estarán disponibles para la comunidad/serán de acceso público. Si Ud. considera que este tiempo es insuficiente, y necesita prorrogar el período de confidencialidad, indique sus motivos y la cantidad de años adicionales que considera necesarios. Marque su opción con "X".
	1 (UN) año
	2 (DOS) años
	3 (TRES) años
	4 (CUATRO) año
	5 (CINCO) años
	Otro.
	Motivos:



INSTRUCTIVO PARA COMPLETAR EL PLAN DE GESTIÓN (PGD)

El PGD no es un documento definitivo, sino que se desarrollará a lo largo del ciclo de vida del proyecto.

INFORMACIÓN SOBRE EL PROYECTO

1 – Datos del Proyecto

Título del Proyecto (en castellano):

“Estudio de propiedades fisicoquímicas de biomoléculas y sistemas biomiméticos mediante técnicas de Modelado Molecular”

indicando además el código asignado por la SCAYT. Averiguar

Título del Proyecto (en inglés):

“Study of chemical physical properties of Biomolecules and Biomimetic Systems using Molecular Modeling Technics”

Descripción del Proyecto (en castellano):

El proyecto se propone estudiar moléculas y sistemas biológicos de interés básico y aplicado, empleando tanto herramientas Bioinformáticas como Simulaciones Computacionales. En particular, se continuará con los estudios de sistemas lipídicos, tanto micelares como de membranas modelo, línea de trabajo que tiene una larga tradición dentro del grupo de investigación. Estos estudios involucran la caracterización estructural y dinámica de diferentes marcadores de espín (5, 12, 16-SASL y Doxil Colestano). Además se está trabajando en el modelado de Interferones alfa y beta, con el objetivo de caracterizar el efecto de la humanización y de fundamentar la selección de mutantes de menor inmunogenicidad, respectivamente. Por otra parte se están realizando simulaciones de Dinámica Molecular de compuestos gémicos peptídicos con el objetivo de caracterizar tanto las primeras etapas de su agregación en fase acuosa, como la unión a ADN.

Descripción del Proyecto (en inglés):

The project aims to study molecules and Biological Systems of basic and applied interest, using both Bioinformatics tools and Computational Simulations. In particular, studies on lipid systems, both micellar and model membranes, will continue, a line of work that has a long tradition within the research group. These studies involve the structural and dynamic characterization of different spin markers (5, 12, 16-SASL and Doxil Cholestane). Furthermore, work is being carried out on the modeling of alpha and beta interferons, with the aim of characterizing the effect of humanization and of supporting the selection of less immunogenic mutants, respectively. On the other hand, Molecular Dynamics simulations of gemini peptide compounds are being carried out with the aim of characterizing both the early stages of their aggregation in the aqueous phase, as well as DNA binding.

Palabras Claves descriptivas del Proyecto (en castellano):

Modelado Molecular, Sistemas Biomiméticos, Dinámica Molecular

Palabras Claves descriptivas del Proyecto (en inglés): Deberá ingresar tres Molecular Modeling, Biomimetic systems, Molecular Dynamic

2- Datos del Director/a del Proyecto



Nombre y Apellido del Titular del Proyecto: Daniel Enrique Rodrigues

Unidad Académica: Facultad de Bioquímica y Cs. Biológicas

Teléfono oficial de contacto: + 54 9 342 4575213

Teléfono móvil de contacto: +54-342-4-723650

E-mail del Director/a del Proyecto: dr.daniel.rodrigues@gmail.com

DATOS RESULTANTES DE LA EJECUCIÓN DEL PROYECTO

Describa la toma de muestras/datos a realizar:

Dada las características propias de las simulaciones computacionales, todos los datos son generados a medida que los programas de simulación avanzan en sus procedimientos. Los datos producidos son recogidos en los discos rígidos de las computadoras de nuestro grupo de investigación, en forma de archivos de diferentes formatos (binarios, comprimidos, de texto, gráfico).

Datos: ¿Existe alguna razón por la cual los datos declarados no deban ser puestos a disposición de la comunidad/ser de acceso público? Deberá marcar con una "X" la opción correcta. En caso de responder afirmativamente, deberá justificar debidamente, comprendiendo que sólo en casos de extrema excepcionalidad esta restricción de acceso a los datos resulta practicable/acceptable.

Se solicita confidencialidad debido a que los resultados serán parte de una publicación científica en una revista especializada del área, para lo cual es necesario que los datos no hayan sido publicados con anterioridad.

Período de Confidencialidad: Es el periodo durante el cual los datos no deberían ser publicados, contado a partir del momento de la toma de los mismos. El periodo máximo para la no publicación es de 5 (CINCO) años posteriores a su obtención. Luego de este periodo, los datos estarán disponibles para la comunidad/serán de acceso público.

Si Ud. considera que este tiempo es insuficiente, y necesita prorrogar el período de confidencialidad, indique sus motivos y la cantidad de años adicionales que considera necesarios.

Deberá indicar los años que considera necesario prorrogar el período de confidencialidad y explicar los motivos.

Daniel E. Rodrigues
Santa Fe, 26 de abril de 2020