

Guía docente de la asignatura

Fecha de aprobación por la Comisión Académica: 19/07/2024

## Diseño Biocomputacional (M43/56/4/37)

**Máster**

Máster Universitario en Ciencias y Tecnologías Químicas, Khemia

**MÓDULO**

Investigación y Desarrollo

**RAMA**

Ciencias

**CENTRO RESPONSABLE DEL TÍTULO**

Escuela Internacional de Posgrado

**Semestre**

Primero

**Créditos**

3

**Tipo**

Optativa

**Tipo de enseñanza**

Presencial

### PRERREQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES

- Conocimientos básicos de química
- Conocimientos básicos de bioquímica y estructura de biomoléculas
- Conocimiento de inglés

### BREVE DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS (Según memoria de verificación del Máster)

- Homología de secuencias y análisis evolutivo.
- Estructura y estabilidad de las biomoléculas en relación al diseño de motivos estructurales.
- Predicción y modelado de la estructura de proteínas.
- Factores determinantes de las interacciones proteína-ligando y proteína-proteína.
- Diseño racional de proteínas y ligandos.
- Diseño semiautomático de proteínas.
- Simulación computacional de sistemas biomoleculares.
- Aplicaciones biotecnológicas y terapéuticas.

### COMPETENCIAS

#### COMPETENCIAS BÁSICAS



- CB6 - Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.
- CB7 - Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.
- CB8 - Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios.
- CB9 - Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.
- CB10 - Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.

### COMPETENCIAS GENERALES

- CG01 - Que los estudiantes sepan asumir las responsabilidades adecuadas en lo que respecta al desarrollo de conocimientos y/o prácticas profesionales

### COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

- CE10 - Planificar, gestionar y desarrollar proyectos científico-tecnológicos con manejo de información y conocimiento de su transferencia hacia otros sectores.
- CE20 - Conocer los procedimientos generales para la determinación de estructuras de macromoléculas que intervienen en sistemas biológicos.
- CE21 - Conocer y manejar las principales herramientas computacionales de aplicación en Investigación Química.

### COMPETENCIAS TRANSVERSALES

- CT02 - Capacidad de gestión del tiempo (referida a su organización y planificación)
- CT04 - Conocimiento y uso de las tecnologías de la información y comunicación (TICs) y de los recursos informáticos (programas, bases de datos, etc.) relativos al ámbito de estudio para adquirir, gestionar y comunicar la información
- CT06 - Trabajo en equipo
- CT07 - Sensibilidad hacia temas medioambientales

## RESULTADOS DE APRENDIZAJE (Objetivos)

Al cursar esta materia el estudiante será capaz de:

- Conocer las bases de datos de secuencias y cómo extraer información de ellas.
- Conocer y manejar los principales algoritmos y programas para el estudio de homología de secuencias y análisis evolutivo. Conocer sus limitaciones y valorar su potencial en el campo de la biomedicina y el diseño de proteínas.
- Conocer las bases de datos de estructura de proteínas y ser capaz de extraer información.
- Ser capaz de utilizar los programas informáticos más comunes para la representación de



la estructura de proteínas.

- Conocer las bases moleculares que determinan la estructura y estabilidad de una proteína así como los fundamentos del mecanismo de su plegamiento y equilibrio conformacional.
- Estar familiarizado con los métodos de predicción de estructura en proteínas.
- Conocer los métodos básicos de simulación molecular y utilizarlos para el estudio de proteínas.
- Conocer los métodos de predicción y análisis experimental de interacción proteína-ligando.
- Estar familiarizado con las principales aplicaciones biotecnológicas del diseño molecular de macromoléculas biológicas.

## PROGRAMA DE CONTENIDOS TEÓRICOS Y PRÁCTICOS

### TEÓRICO

#### Tema 1. Bases estructurales de las funciones de las macromoléculas biológicas

- Introducción.- Relación estructura función en biomoléculas.
- Revisión general de las conformaciones de proteínas. Clasificación estructural
- De la estructura a la función. Reconocimiento molecular y sitios activos.

#### Tema 2. Análisis de secuencias y genomas

- Diversidad genética y evolución
- Homología. Alineamiento múltiple de secuencias.
- Homología de secuencias y análisis evolutivo

#### Tema 3. Fuerzas no covalentes y funciones de energía potencial

- Estabilidad de biomoléculas
- Introducción a las fuerzas no covalentes
- Interacciones electrostáticas
- Interacciones de van der Waals.
- Enlaces de hidrógeno
- Efecto hidrofóbico
- Impedimentos estéricos
- Funciones de energía para la simulación molecular

#### Tema 4. Predicción de la estructura tridimensional de las proteínas

- Comparación de secuencias y estructuras de proteínas
- Predicción de características unidimensionales
- Predicción de estructura tridimensional mediante diseño por homología
- Predicción de estructura tridimensional mediante reconocimiento de plegamiento
- Predicción por métodos ab initio
- Evaluación de los métodos de predicción

#### Tema 5. Ingeniería y diseño de proteínas

- Herramientas generales para la ingeniería de proteínas
- Diseño racional de proteínas y ligandos
- Diseño de novo



- Rediseño de proteínas naturales
- Diseño irracional: presentación en fagos y evolución dirigida

## PRÁCTICO

- Práctica 1.- Visualización de elementos estructurales en proteínas
- Práctica 2.- Alineamiento de secuencias
- Práctica 3.- Modelado por homología
- Práctica 4.- Estabilización de una proteína a partir de análisis de secuencias
- Práctica 5.- Diseño de hélices alfa

## BIBLIOGRAFÍA

### BIBLIOGRAFÍA FUNDAMENTAL

- "Introduction to Bioinformatics. Fourth edition". Arthur M. Lesk (2014) Oxford University Press
- "Bioinformatics. Sequence, structure and databanks". Des Higgins, Willie Taylor (2000), Oxford University press.
- "Protein bioinformatics. An algorithmic approach to sequence and structure analysis"; Ingvar Eidhammer, Inge Jonassen, William R. Taylor (2004) John Wiley and Sons.
- The Molecules of Life. Physical and Chemical Principles; J. Kuriyan, B. Konformi, D. Wmmer (2013) (Inglés)
- Protein actions. Principles and modeling; I. Bahar, R.L. Jernigan, K.A. Dill (2017). Ed. Garland Science (Inglés)
- "The Organic Chemistry of Drug Design and Drug Action. Third Edition". Richard B. Silverman, Mark. W. Hollaway. (2014) Academic Press. Elsevier.

### BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

- "Protein surface recognition. Approaches for drug discovery"; Ernest Giralt, Mark W. Peczuh, Xavier Salvatella (2011) John Wiley and Sons
- "Estructura de proteínas", Carlos Gómez-Moreno Calera, Javier Sancho Sanz. (2003) Ariel Ciencia

## ENLACES RECOMENDADOS

Plataforma PRADO de apoyo a la docencia: <https://prado.ugr.es/>

## METODOLOGÍA DOCENTE

- MD01 Clases magistrales/expositivas. El equipo docente podrá utilizar para su desarrollo algunos de los siguientes métodos: sesión expositiva, aprendizaje basado en problemas, ejemplificación y estudio de casos.
- MD02 Clases de resolución de problemas. El equipo docente podrá utilizar algunos de los siguientes métodos para su desarrollo: Aprendizaje basado en problemas; ejemplificación y estudio de casos.



- MD03 Clases prácticas. El equipo docente podrá recurrir a métodos como estudio de casos, análisis diagnósticos, prácticas de laboratorio, aula de informática, visitas, búsqueda de datos, etc.
- MD04 Talleres, seminarios, debates, exposición (y/o defensa) de trabajos individuales o en grupo. El equipo docente podrá utilizar para su desarrollo algunos de los siguientes métodos: aprendizaje basado en problemas, ejemplificación y estudio de casos
- MD05 Tutorías: Programadas y de seguimiento (para trabajos de fin de Máster y Prácticas de Empresa), pudiéndose utilizar en las modalidades personalizada o en grupo, sincrónica (presenciales) o asincrónica (virtuales). La modalidad seleccionada por el equipo docente quedará recogida en la Guía Docente de cada materia
- MD07 Estudio y trabajo autónomo, individual y/o en grupo

## EVALUACIÓN (instrumentos de evaluación, criterios de evaluación y porcentaje sobre la calificación final)

### EVALUACIÓN ORDINARIA

El artículo 17 de la Normativa de Evaluación y Calificación de los Estudiantes de la Universidad de Granada establece que la convocatoria ordinaria estará basada preferentemente en la evaluación continua del estudiante, excepto para quienes se les haya reconocido el derecho a la evaluación única final.

#### Instrumentos de evaluación

- Pruebas escritas. Exámenes o pruebas breves a realizar a lo largo del curso basadas en la resolución de ejercicios, casos o problemas propuestos con anterioridad por el profesor. Su **formato** (preguntas largas, cortas, pruebas respuesta múltiple, etc.) será seleccionado por el equipo docente encargado de impartir la materia. Su contenido y duración serán establecidos de acuerdo con la Normativa de Evaluación y Calificación aprobada por la UGR en Consejo de Gobierno de 20 de Mayo de 2013.
- Evaluación de asistencia y participación activa. Se basa en la valoración de actitudes e iniciativas de participación activa e interactiva en el desarrollo de la clase, en las tutorías, o en el grado de compromiso en el desarrollo de los trabajos planeados, en las prácticas de laboratorio, prácticas externas o cualquier otra tarea asignada, pudiéndose evaluar, si procede, la capacidad de trabajo en equipo. Se podrá optar por la utilización de listas de cotejo, rúbricas o instrumentos desarrollados por el equipo docente encargado de impartir la materia.
- Exposición de trabajos. El alumno desarrollará un trabajo, individual o en grupo, planteado y tutelado por el profesor y lo expondrá en una presentación breve ante el resto de la clase, sometiéndose a debate posterior con el resto de los alumnos y el profesor.
- Resolución de ejercicios o proyectos. Proyecto o ejercicio complejo que, el alumno o grupo de alumnos, deberá ir resolviendo por etapas a lo largo del curso. Cada etapa o hito alcanzado será evaluado y el alumno recibirá retroalimentación sobre su éxito o fracaso.
- Examen final. Este sistema de evaluación será aplicable únicamente para evaluar a alumnos que, de acuerdo con la Normativa de Evaluación y Calificación aprobada por la UGR en Consejo de Gobierno de 20 de Mayo de 2013, y durante los primeros quince días desde el comienzo de impartición de la materia elijan esta modalidad

#### Criterios de evaluación y porcentaje sobre la calificación final:



La evaluación será continua, con un seguimiento del esfuerzo del alumno y sus progresos a lo largo del curso. Los criterios evaluación se basarán en:

- La valoración del interés del alumno que se refleja principalmente en la asistencia regular a las clases y en la participación activa en las discusiones que se desarrollan en las mismas.
- El progreso del alumno en los conocimientos impartidos, que podrá valorarse de acuerdo con su capacidad de abordaje de los problemas y prácticas que se van proponiendo a medida que se desarrolla el curso.
- La corrección y calidad de los informes elaborados sobre las prácticas realizadas.
- La capacidad de discusión y defensa de los trabajos realizados en una sesión de evaluación oral individualizada con el profesor.

En la convocatoria ordinaria la calificación final será una media ponderada de:

- Informes de prácticas (30%).- Se valorará la presentación y calidad de los informes de prácticas presentados y la capacidad de discusión y debate sobre las prácticas realizadas.
- Pruebas de clase (10%)
- Asistencia y participación (10%)
- Examen escrito sobre los contenidos teóricos y prácticos de la asignatura (50%)

Para superar la asignatura será necesario haber presentado todos los informes de prácticas y haber obtenido una calificación mayor que cuatro en el examen, pruebas de clase y sesión de discusión y debate sobre las prácticas.

## EVALUACIÓN EXTRAORDINARIA

El artículo 19 de la Normativa de Evaluación y Calificación de los Estudiantes de la Universidad de Granada establece que los estudiantes que no hayan superado la asignatura en la convocatoria ordinaria dispondrán de una convocatoria extraordinaria. A ella podrán concurrir todos los estudiantes, con independencia de haber seguido o no un proceso de evaluación continua. De esta forma, el estudiante que no haya realizado la evaluación continua tendrá la posibilidad de obtener el 100% de la calificación mediante la realización de una prueba y/o trabajo.

La evaluación en convocatoria extraordinaria se llevará a cabo en un único acto académico el día de la convocatoria oficial de examen para la asignatura mediante un examen escrito que incluirá preguntas tanto del temario teórico (50% de la nota) como práctico (50% de la nota), que garanticen que el alumno ha adquirido la totalidad de las competencias descritas en la presente guía docente. En el caso de la parte práctica, estas preguntas podrán incluir la realización de supuestos prácticos manejando el software y las bases de datos utilizados a lo largo del curso.

## EVALUACIÓN ÚNICA FINAL

El artículo 8 de la Normativa de Evaluación y Calificación de los Estudiantes de la Universidad de Granada establece que podrán acogerse a la evaluación única final, el estudiante que no pueda cumplir con el método de evaluación continua por causas justificadas.

Para acogerse a la evaluación única final, el estudiante, en las dos primeras semanas de impartición de la asignatura o en las dos semanas siguientes a su matriculación si ésta se ha producido con posterioridad al inicio de las clases o por causa sobrevenidas. Lo solicitará, a través del procedimiento electrónico, a la Coordinación del Máster, quien dará traslado al profesorado



correspondiente, alegando y acreditando las razones que le asisten para no poder seguir el sistema de evaluación continua.

La evaluación en tal caso consistirá en un único acto académico el día de la convocatoria oficial de examen para la asignatura mediante un examen escrito que incluirá preguntas tanto del temario teórico (50% de la nota) como práctico (50% de la nota), que garanticen que el alumno ha adquirido la totalidad de las competencias descritas en la presente guía docente. En el caso de la parte práctica, estas preguntas podrán incluir la realización de supuestos prácticos manejando el software y las bases de datos utilizados a lo largo del curso.

### INFORMACIÓN ADICIONAL

Información de interés para estudiantado con discapacidad y/o Necesidades Específicas de Apoyo Educativo (NEAE): [Gestión de servicios y apoyos](https://ve.ugr.es/servicios/atencion-social/estudiantes-con-discapacidad) (<https://ve.ugr.es/servicios/atencion-social/estudiantes-con-discapacidad>).

