

| Titulació  | Tipus | Curs |
|------------|-------|------|
| Bioquímica | OP    | 4    |

## Professor/a de contacte

Nom: Guillem Prats Ejarque

Correu electrònic: guillem.prats.ejarque@uab.cat

## Equip docent

Ester Boix Borràs

Alex Peralvarez Marin

Marc Torrent Burgas

Nuria Benseny Cases

(Extern) Fernando Gil

(Extern) Xavier Carpena

## Idiomes dels grups

Podeu consultar aquesta informació al [final](#) del document.

## Prerequisits

L'alumnat haurà d'haver superat les assignatures Tècniques Instrumentals Bàsiques, Tècniques Instrumentals Avançades i Química i Enginyeria de Proteïnes.

## Objectius

L'objectiu general de l'assignatura és l'estudi estructural i funcional de les macromolècules biològiques.

L'assignatura inclou una descripció de les tècniques actuals de resolució i predicció de l'estructura tridimensional de macromolècules biològiques, així com les metodologies experimentals i computacionals per a l'estudi del seu comportament dinàmic i funcions.

Es donarà màxima prioritat a l'aplicació pràctica de la matèria impartida, de manera que els estudiants puguin experimentar ells mateixos les tècniques descrites i simular el comportament de les macromolècules i els seus complexos en un context biològic.

Finalment, l'anàlisi estructural -funcional de macromolècules i la predicció de complexos supramoleculars s'aplicarà a exemples pràctics d'identificació de les bases moleculars de malalties i al disseny de fàrmacs.

## Resultats d'aprenentatge

1. CM35 (Competència) Revisar les aplicacions de les tecnologies emergents associades a la radiació de sincrotró i la nanotecnologia en l'àrea de la bioquímica per donar respostes innovadores a les necessitats de la societat.
2. CM37 (Competència) Integrar els coneixements de la bioquímica i la biologia molecular amb les tecnologies emergents associades a la radiació de sincrotró i la nanotecnologia.
3. KM39 (Coneixement) Descriure els fonaments físics i les aplicacions de les tècniques espectroscòpiques i de microscòpia utilitzades en l'anàlisi estructural i en l'estudi de les biomolècules i les membranes biològiques.
4. SM39 (Habilitat) Aplicar els recursos informàtics en el tractament de dades de tècniques espectroscòpiques i de microscòpies, així com en el càlcul de paràmetres específics.
5. SM40 (Habilitat) Aplicar les tècniques espectroscòpiques i de microscòpia a l'estudi de les biomolècules, biomembranes i nanopartícules.
6. SM41 (Habilitat) Aplicar les normes generals de seguretat en la realització de tècniques espectroscòpiques, així com les normatives específiques en la manipulació de material biològic i de nanopartícules.

## Continguts

### TEORIA

Tema 1. Tècniques microscòpiques avançades.

Criomicroscòpia electrònica, criotomografia; determinació de l'estructura de partícules úniques; microscòpia electrònica de transmissió, microscòpia electrònica de rastreig. Microscòpia de força atòmica i d'efecte túnel; espectroscòpia de forces; nanotribologia. Aplicacions en Biotecnologia i Biomedicina.

Tema 2. Aplicacions biològiques de la radiació de sincrotró.

Introducció a la producció i característiques de la llum sincrotró. Microscòpia de raigs X i d'infraroig: introducció a la tècnica i aplicacions en biomedicina.

Tema 3. Cristal·lografia de raigs X i aplicacions

Fonaments de la determinació de l'estructura tridimensional de macromolècules per cristal·lografia; propietats dels cristalls, processament de dades de difracció i reconstrucció del model 3D. Noves metodologies amb fonts de llum de sincrotró de 4a generació (làsers d'electrons lliures, cristal·lografia en sèrie, experiments de resolució temporal i pel·lícules moleculars). Eines per a l'anàlisi de motius funcionals en macromolècules.

Tema 4. Eines bioinformàtiques aplicades a l'anàlisi estructural de macromolècules.

Introducció a la bioinformàtica estructural. Mètodes de predicció i comparació d'estructures. Identificació de dominis funcionals. Aplicacions de la intel·ligència artificial en la predicció de l'estructura de les biomolècules. Estratègies de docking i aplicacions en el disseny de fàrmacs. Dinàmica molecular i predicció de conformacions estructurals. Estudi de xarxes d'interaccions en complexos moleculars.

### PROBLEMES

Es proposarà la resolució de problemes pràctics que facilitaran la consolidació dels conceptes teòrics impartits. Bona part de les classes de problemes s'impartiran a l'aula d'informàtica, on es treballarà amb alguns programes de Biologia Estructural.

### PRÀCTIQUES

Es realitzaran 3 sessions de Pràctiques

1a sessió: Pràctiques d'aplicacions informàtiques a la resolució d'estructures per Microscopia Electrònica en el laboratori de la Unitat de Biofísica.

2a sessió: Pràctiques de resolució d'estructures tridimensionals per Cristal·lografia de raigs X a l'aula d'informàtica SID.

3a sessió: Pràctiques d'anàlisi de regions funcionals en macromolècules a l'Aula informàtica SID.

#### SEMINARI:

Es preveu incloure un seminari especialitzat.

#### Sortida de camp:

Visita guiada al laboratori de Llum de sincrotró ALBA. Seminari a càrrec del Dr. Fernando Gil i explicació del funcionament de les estacions: BL-09, Microscopia de raigs X; BL-11, Difracció no cristal·lina i BL-13, Cristal·lografia de macromolècules.

#### Tutories

Es podran realitzar sessions de tutories durant el semestre. L'objectiu d'aquestes sessions és el de resoldre dubtes i repassar conceptes.

## Activitats formatives i Metodologia

| Títol                                       | Hores | ECTS | Resultats d'aprenentatge     |
|---------------------------------------------|-------|------|------------------------------|
| Tipus: Dirigides                            |       |      |                              |
| Classes teòriques                           | 30    | 1,2  | CM35, CM37, KM39, SM39, SM40 |
| Tipus: Supervisades                         |       |      |                              |
| Pràctiques                                  | 9     | 0,36 | SM39, SM40, SM41             |
| Problemes                                   | 10    | 0,4  | CM35, CM37, SM39, SM40       |
| Tipus: Autònomes                            |       |      |                              |
| Estudi personal                             | 52,5  | 2,1  | CM35, CM37, SM39             |
| Preparació de problemes/treballs científics | 41    | 1,64 | SM39, SM40, SM41             |

#### Classes de teoria

El professorat explicarà el contingut del temari amb el suport de material audiovisual que estarà a disposició dels estudiants al Campus Virtual de l'assignatura. Aquest material de suport estarà escrit en català, castellà o anglès.

Es preveu incloure un seminari d'un especialista en el camp.

#### Classes de problemes

Al llarg del curs es dedicaran 8 hores a sessions de classe de problemes. Les classes inclouran sessions a l'aula d'informàtica.

### Pràctiques

El protocol de pràctiques es penjarà al Campus Virtual amb anterioritat a la sessió pràctica.

Les pràctiques inclouran sessions a l'aula d'informàtica.

Així mateix es realitzaran visites guiades a grans instal·lacions i equipaments especialitzats.

Cal comparèixer a les pràctiques amb el protocol de pràctiques (disponible al Campus Virtual) imprès i prèviament llegit i una llibreta per anotar les observacions realitzades i les dades obtingudes.

Les pràctiques, així com la seva avaluació, es duran a terme individualment o en grups de dues persones. L'assistència a les pràctiques és obligatòria, excepte en els casos en què hi hagi una causa justificada documentalment.

### Tutories

Material disponible al Campus Virtual de l'assignatura

Nota: es reservaran 15 minuts d'una classe, dins del calendari establert pel centre/titulació, perquè els alumnes completin les enquestes d'avaluació de l'actuació del professorat i d'avaluació de l'assignatura.

## Avaluació

### Activitats d'avaluació continuada

| Títol                                    | Pes | Hores | ECTS | Resultats d'aprenentatge |
|------------------------------------------|-----|-------|------|--------------------------|
| Avaluació de Pràctiques                  | 15% | 1     | 0,04 | SM39, SM40, SM41         |
| Avaluació de Problemes                   | 15% | 1,25  | 0,05 | CM37, SM39, SM40         |
| Avaluació prova teòrica 1er +2on parcial | 70% | 5,25  | 0,21 | CM35, CM37, KM39         |

La qualificació es basarà en els seg elements:

- 1- Proves de continguts teòrics: màxim 7 punts
- 2- Proves de problemes: màxim 1,5 punt
- 3- Participació en les pràctiques: màxim 1,5 punt

Es podran incloure tasques per entregar de qualsevol de les tres tipologies (teoria, problemes i pràctiques).

El contingut de l'assignatura s'avaluarà distribuït en dos exàmens parcials.

El pes proporcional en la nota final de cadascun dels temes serà proporcional al nombre d'hores impartides per cada professor.

L'assignatura es considerarà superada quan la nota final sigui igual o superior a 50 sobre un màxim de 100.

### Altres consideracions

Els estudiants que no puguin assistir a una prova d'avaluació individual per causa justificada i aportin la documentació oficial corresponent al Coordinador de l'assignatura, tindran dret a realitzar la prova en qüestió en una altra data.

En la nota final es tindrà en compte la participació a classe.

Per participar a la recuperació, l'alumnat ha d'haver estat prèviament avaluat en un conjunt d'activitats el pes de les quals equivalgui a un mínim de dues terceres parts de la qualificació total de l'assignatura o mòdul. Per tant, l'alumnat obtindrà la qualificació de "No Avaluable" quan les activitats d'avaluació realitzades tinguin una ponderació inferior al 67% en la qualificació final.

Normativa per pujar nota:

És possible millorar la nota dels exàmens parcials en ocasió de l'examen de recuperació. Es considerarà la segona notaobtinguda sempre i quan sigui superior a l'obtinguda en el primer examen.

En cas que la nota obtinguda en la segona oportunitat sigui inferior en 1 punt o més a la primera nota obtinguda, es considerarà que la nota definitiva d'aquesta part és la mitjana de les dues notes.

L'alumne tindrà 10 minuts a l'inici de l'examen per a decidir si vol realitzar o no la prova.

En l'adjudicació de la qualificació de Matrícula d'honor es prioritzaran les notes obtingudes en els exàmens parcials.

#### Càlcul de la qualificació final

$$\text{Nota final} = T \cdot 0,7 + \text{Probl} \cdot 0,15 + \text{Pract} \cdot 0,15$$

T (nota final de teoria)

Probl (nota final problemes)

Pract (nota de pràctiques)

Per a aprovar l'assignatura la nota final ha de ser  $\geq 5$

#### Avaluació única:

L'alumnat que s'aculli a l'avaluació única ha de fer de forma presencial obligatòria totes les sessions de pràctiques de laboratori, pràctiques a l'aula d'informàtica i sortida de camp (visita al sincrotró).

L'avaluació única consisteix en una prova de síntesi única (amb preguntes de format variable sobre els continguts de les sessions de totes les tipologies). Totes les tasques encarregades durant el curs s'hauran d'entregar o durant la sessió corresponent o el dia de l'examen final.

La prova d'avaluació única es farà coincidint amb la data fixada al calendari de l'examen final per l'avaluació continuada i s'aplicarà el mateix sistema de recuperació que per l'avaluació continuada.

El càlcul de la nota final pels alumnes que demanin l'avaluació única serà el següent:

$$\text{Nota final} = 0,80 \cdot \text{Teoria} + 0,10 \cdot \text{Problemes} + 0,10 \cdot \text{Pràctiques}$$

#### Nota sobre l'ús de la IA

En aquesta assignatura, es permet l'ús de tecnologies d'Intel·ligència Artificial (IA) com a part integrant del desenvolupament del treball, sempre que el resultat final reflecteixi una contribució significativa de l'estudiant en l'anàlisi i la reflexió personal. L'estudiant haurà d'identificar clarament quines parts han estat generades amb aquesta tecnologia, especificar les eines emprades i incloure una reflexió crítica sobre com aquestes han influït en el procés i el resultat final de l'activitat. La no transparència de l'ús de la IA es considerarà falta

d'honestat acadèmica i pot comportar una penalització en la nota de l'activitat, o sancions majors en casos de gravetat.

## **Bibliografia**

## ENLLAÇOS WEB

- Training Protein Data Bank Portal



<https://pdb101.rcsb.org>

- Protein Crystallography course. Structural Medicine. Cambridge University, MRC-LMB:

<http://www-structmed.cimr.cam.ac.uk/course.html>

- University of Cambridge. Crystallography. Teaching and Learning packages.

<http://www.doitpoms.ac.uk/tlplib/crystallography3/index.php>



- Dpt. de Biología Estructural. CSIC, Madrid

<http://www.xtal.iqfr.csic.es/Cristalografia/index-en.html>





Llibres electrònics de lliure accés a la biblioteca de la UAB:

Integrative Structural Biology with Hybrid Methods Advances in Experimental Medicine and Biology. Vol. 1105.  
Haruki Nakamura; Gerard Kleywegt; Stephen K. Burley and John L. Markley. Springer. Cohen et al. editors.  
2018



## LLIBRES DE CONSULTA

Molecular Biology of Assemblies and Machines. A. C. Steven et al. (2016) Garland Science.

Proteins. Structures and Molecular Properties. Creighton T.E., (1993) 2ed Freeman W.H. and Co.

Introduction to Biophysical Methods for Protein and Nucleic Acid Research Glasel and Deutscher (1995) Academic Press

Crystal Structure Analysis for Chemists and Biologists. J.P. Glusker, M. Lewis and M. Rossi (1994) VCH Publishers, Inc.

## Programari

UCSF Chimera; CCP4i2; Coot, Phenix; Modeller, Autodock, AlphaFold

## Grups i idiomes de l'assignatura

La informació proporcionada és provisional fins al 30 de novembre de 2025. A partir d'aquesta data, podreu consultar l'idioma de cada grup a través d'aquest [enllaç](#). Per accedir a la informació, caldrà introduir el CODI de l'assignatura