

Titulación	Tipo	Curso
Bioinformática / Bioinformatics	OT	0

## Contacto

Nombre: Xavier Daura Ribera

Correo electrónico: xavier.daura@uab.cat

## Equipo docente

Ester Boix Borrás

Leonardo Pardo Carrasco

Jean Didier Pierre Marechal

Angel Gonzalez Wong

Aleix Quintana García

Marc Ciruela Jardí

Laura Masgrau Fontanet

Alex Peralvarez Marin

Oscar Conchillo Solé

Marc Torrent Burgas

Xavier Daura Ribera

## Idiomas de los grupos

Puede consultar esta información al [final](#) del documento.

## Prerrequisitos

Para cursar este módulo deben haberse superado los módulos I y II del máster (Programming in Bioinformatics and Core Bioinformatics). También serán necesarios conocimientos básicos de química y/o bioquímica.

Es obligatorio tener el nivel B2 (o equivalente) de inglés.

## Objetivos y contextualización

Las proteínas representan un campo muy amplio de investigación, desde su estudio como dianas terapéuticas en el diseño de fármacos y otras terapias, al diseño de nuevos enzimas como biocatalizadores más eficientes para ser utilizados en nuevos procesos industriales de interés y / o en procesos más respetuosos con el medio ambiente.

La modelización molecular es una herramienta muy útil en todos estos campos y que se ha convertido en una parte esencial de la investigación llevada a cabo, tanto en el mundo académico como en las empresas.

En este módulo, se proporcionarán los conocimientos fundamentales y prácticos para que los / las estudiantes se puedan desarrollar como científicos en estas áreas.

El objetivo de este módulo es, pues, proporcionarles conocimientos teóricos y prácticos sobre:

- los fundamentos físicos y los conceptos que sostienen las diferentes técnicas de modelización molecular
- los métodos, tanto básicos como los más punteros, utilizados en el campo
- visión de sus principales campos de aplicación, con especial énfasis en el diseño de fármacos

## Competencias

- Analizar e interpretar bioinformáticamente los datos que se derivan de las tecnologías ómicas.
- Comprender las bases moleculares y las técnicas experimentales estándares más comunes en las investigaciones ómicas (genómica, transcriptómica, proteómica, metabolómica, interactómica, etc.).
- Comunicar en lengua inglesa de manera clara y efectiva los resultados de sus investigaciones.
- Diseñar y aplicar la metodología científica en la resolución de problemas.
- Identificar las necesidades bioinformáticas de los centros de investigación y las empresas del sector de la biotecnología y la biomedicina.
- Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.
- Proponer soluciones bioinformáticas a problemas derivados de las investigaciones ómicas.
- Proponer soluciones innovadoras y emprendedoras en su campo de estudio.
- Utilizar sistemas operativos, programas y herramientas de uso común en bioinformática, así como, manejar plataformas de cómputo de altas prestaciones, lenguajes de programación y análisis bioinformáticos.
- Utilizar y gestionar información bibliográfica y recursos informáticos en el ámbito de estudio.

## Resultados de aprendizaje

1. Comprender las técnicas biomoleculares y farmacológicas de ensayos funcionales de proteínas.
2. Comprender las técnicas de cristalográfia de rayos-X y RMN para obtener la estructura de proteínas.
3. Comunicar en lengua inglesa de manera clara y efectiva los resultados de sus investigaciones.
4. Crear modelos de farmacóforos a partir de las estructuras de un conjunto de ligandos.
5. Describir el funcionamiento, características y limitaciones de las técnicas de análisis y visualización de estructuras de proteínas.
6. Describir y aplicar las técnicas de modelización por homología de la estructura tridimensional de la proteína.
7. Describir y caracterizar las técnicas computacionales de dinámica molecular para estudiar la estructura y función de proteínas.
8. Describir y caracterizar las técnicas de predicción de la estructura secundaria a partir de la secuencia amino ácida.
9. Diseñar y aplicar la metodología científica en la resolución de problemas.
10. Establecer las relaciones correspondientes entre secuencia aminoacídica, estructura tridimensional y función proteica, utilizando las fuentes de datos biológicos y los fundamentos del análisis bioinformático.

11. Identificar y aplicar las técnicas para el diseño molecular asistido por ordenador (CAD, computer assisted drug design)
12. Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.
13. Proponer soluciones innovadoras y emprendedoras en su campo de estudio.
14. Realizar búsquedas (cribado virtual, virtual screening) en librerías de estructuras químicas.
15. Recognise and apply different prediction methods of the functions and three-dimensional structure of proteins.
16. Reconocer la importancia estratégica del modelado de proteínas en el ámbito de la salud humana, especialmente en sus aplicaciones a la medicina personalizada y la farmacogenómica.
17. Simular la unión del ligando al receptor mediante técnicas de docking y dinámica molecular
18. Utilizar los programas de cálculo de estructura.
19. Utilizar los programas de cálculo de las relaciones estructura-actividad.
20. Utilizar los programas de visualización de estructura.
21. Utilizar y gestionar información bibliográfica y recursos informáticos en el ámbito de estudio.

## Contenido

MÓDULO 4: Estructura y función de proteínas y diseño de fármacos

Parte I MODELIZACIÓN MOLECULAR. CONCEPTOS BÁSICOS.

Conceptos básicos

Introducción

Cálculo de la energía (PES, QM, campos de fuerza, QM/MM)

Exploración conformacional (diferente de MD: MC, GA, NMA)

Parte II DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL Y MODELOS

Métodos para la caracterización de estructuras de proteínas

Cristalografía de rayos X

RMN

Microscopía crioelectrónica

Modelización estructural

Basada en homología

AlphaFold

Parte III La DINÁMICA MOLECULAR (MD)

La Dinámica molecular (MD), una técnica de base

Conceptos básicos

MD en agua

MD en la membrana

Métodos *Coarse grained*

## Scripting y análisis

Métodos de mostreo mejorado (metadinámica, GaMD, ...)

Energía libre: TI, FEP, MM/PBSA

## Parte IV DISEÑO DE FÁRMACOS

Conceptos básicos en farmacología

Principales dianas terapéuticas y fármacos comerciales: quinasas, receptores nucleares, receptores acoplados a proteínas G, proteínas transportadoras de membrana

Descriptores moleculares

ADME-Tox

Modelos de farmacóforos basados en el ligando o en la estructura

Técnicas de docking (acoplamiento)

Docking proteína - ligando

Docking proteína - proteína

Cribado virtual

Aplicaciones de la MD al diseño de fármacos

## Actividades formativas y Metodología

Título	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
<hr/>			
Tipo: Dirigidas			
Clases de teoría	32	1,28	1, 2, 3, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 13, 15, 16, 12, 21
Resolución de problemas en clase y prácticas en el laboratorio computacional	40	1,6	3, 4, 5, 6, 7, 8, 14, 9, 10, 11, 13, 15, 17, 12, 19, 18, 20, 21
Seminarios	2	0,08	3
<hr/>			
Tipo: Autónomas			
Estudio individual	224	8,96	1, 2, 4, 5, 6, 7, 8, 14, 9, 10, 11, 13, 15, 16, 17, 12, 19, 18, 20, 21

La metodología combina clases teóricas, resolución de problemas en clase, prácticas en el laboratorio de computación, seminarios, estudio individual por parte del alumnado y tareas a entregar. Se utilizará la plataforma virtual de la UAB.

Nota: se reservarán 15 minutos de una clase dentro del calendario establecido por el centro o por la titulación para que el alumnado rellene las encuestas de evaluación de la actuación del profesorado y de evaluación de la asignatura o módulo.

## Evaluación

### Actividades de evaluación continuada

Título	Peso	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Soft skills	10%	0	0	3, 9, 13, 12, 21
Tests individuales de teoría y práctica	40%	2	0,08	1, 2, 4, 5, 6, 7, 8, 14, 10, 11, 15, 16, 17, 19, 18, 20
Trabajos realizados y presentados por el alumnado (portfolio del estudiante)	50%	0	0	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 14, 9, 10, 11, 13, 15, 16, 17, 12, 19, 18, 20, 21

El sistema de evaluación está organizado en tres actividades principales. Habrá, además, un examen de recuperación. Los detalles de las actividades son:

#### Actividades de evaluación principales

- Soft skills (10%): asistencia y participación en clase, competencias transversales.
- Portafolio del estudiante (50%): trabajos hechos y presentados por el alumno a lo largo del curso. Ninguna de las actividades de evaluación individuales representará más del 50% de la nota final.
- Prueba teórica y práctica individual (40%): habrá un examen al final de este módulo.

#### Examen de recuperación

Para poder participar en el proceso de recuperación, el alumno deberá previamente haber participado en como mínimo el equivalente a dos tercios de la nota final del módulo en actividades de evaluación. El profesorado informará de los procedimientos y plazos para el proceso de recuperación.

#### No evaluable

El alumno será calificado como "No evaluable" cuando el peso de la evaluación en la que ha participado sea inferior al equivalente al 67% de la nota final del módulo.

Esta asignatura/módulo no prevee el sistema de evaluación única.

Uso de la IA (modelo de uso restringido): Para esta asignatura, se permite el uso de tecnologías de Inteligencia Artificial (IA) exclusivamente para las tareas bioinformáticas que lo requieran y en tareas de apoyo, como la búsqueda bibliográfica o de información, la corrección de textos o las traducciones. En cuanto al uso en tareas de apoyo, el estudiante deberá identificar claramente qué partes han sido generadas con esta tecnología, especificar las herramientas empleadas e incluir una reflexión crítica sobre cómo estas han influido en el proceso y en el resultado final de la actividad. La falta de transparencia en el uso de la IA en esta actividad evaluable se considerará una falta de honestidad académica y podrá conllevar una penalización parcial o total en la nota de la actividad, o sanciones mayores en casos graves.

## Bibliografía

Molecular Modeling principles and applications, A. Leach, Ed. Pearson (i.e. second edition ISBN-13: 978-0582382107) (documento físico disponible en la biblioteca de la UAB)

Essential of Computational Chemistry, C. J. Cramer, (i.e. second Edition, ISBN-13: 978-0470091821) (documento electrónico y físico disponibles en la biblioteca)

Introduction to Computational Chemistry. Frank Jensen. JohnWiley & Sons Ltd. (ISBN: 0470011874, 2007) (documento electrónico disponible en la biblioteca)

Python, how to think like a computer scientist <http://www.greenteapress.com/thinkpython/> (documento electrónico disponible en la biblioteca)

Computational and Visualization techniques for structural bioinformatics using chimera, Forbes J. Burkowski, CRC press (documento electrónico disponible en la biblioteca)

## Software

En Linux:

UCSF Chimera
UCSF ChimeraX
PyMol
Gaussian
Gaussview
VMD
AMBER
Ambertools
Modeller
AlphaFold
Gromacs
LigandScout
Datawarrior
Conda
grace

Jupyter Notebook
Matplotlib
Python
Rasmol
ssh
xxdiff

## Grupos e idiomas de la asignatura

La información proporcionada es provisional hasta el 30 de noviembre de 2025. A partir de esta fecha, podrá consultar el idioma de cada grupo a través de este [enlace](#). Para acceder a la información, será necesario introducir el CÓDIGO de la asignatura

Nombre	Grupo	Idioma	Semestre	Turno
(PLABm) Prácticas de laboratorio (máster)	1	Inglés	primer cuatrimestre	mañana-mixto
(SEMm) Seminarios (màster)	1	Inglés	primer cuatrimestre	mañana-mixto
(TEm) Teoría (máster)	1	Inglés	primer cuatrimestre	mañana-mixto