

Titulació	Tipus	Curs
Nanociència i Nanotecnologia	OP	4

Professor/a de contacte

Nom : David Reverter Cendros

Correu electrònic : david.reverter@uab.cat

Equip docent

David Reverter Cendros

Idiomes dels grups

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

Prerequisits

No hi ha prerequisits oficials, però se suposa que l'estudiant ha adquirit prèviament coneixements suficientment sòlids de les assignatures dels tres primers cursos, en especial de les assignatures de 1r curs Fonaments de Bioquímica, Reactivitat química i Biologia cel·lular, de 2n curs Biologia molecular i Química orgànica, i de 3r curs Espectroscòpia molecular i Química analítica.

Com en altres matèries, gran part de la bibliografia està en anglès, idioma que també és utilitzat de manera important a les figures i presentacions projectades a les classes de teoria i en altres activitats. S'avaluarà positivament que els alumnes el facin servir en alguna activitat dirigida (Problemes, Seminaris ... etc).

Objectius

Objectius generals. En aquesta assignatura s'estudien les característiques estructurals, funcionals i de reactivitat/interacció dels aminoàcids, els pèptids i les proteïnes. També, com han evolucionat biològicament i com podem transformar-les per redisseny racional, evolució dirigida o modificació química-biològica en el laboratori a fi que adoptin estructures, superestructures i propietats d'interès fonamental i aplicat. Les proteïnes són molècules estructurals, reguladores i efectores en la majoria de processos bioquímics i biològics, naturals/patològics/d'interès industrial, així com protagonistes habituals i entre els més diversos d'ells. El coneixement de les seves propietats i estratègies per a transformar-les es fonamental per a la comprensió i domini aprofundit d'un bon nombre de matèries del Grau de Nanociència i Nanotecnologia.

Objectius concrets de l'assignatura.

- Aprofundir en el coneixement de les característiques físic-químiques dels aminoàcids, pèptids i proteïnes, així com de la seva reactivitat i modificacions.
- Descriure i aplicar les metodologies per a l'anàlisi de la seqüència de proteïnes i la síntesi de pèptids.
- Reconèixer els elements estructurals, els diferents nivells de complexitat, els tipus de plegaments de

- proteïnes i la seva capacitat de formació d'estructures d'ordre superior.
- Saber recórrer a les fonts d'informació adequades per establir classificacions estructurals de proteïnes.
- Conèixer i saber explicar els mètodes més habituals d'anàlisi de la conformació i l'estabilitat de les proteïnes, inclosos els d'anàlisi tridimensional.
- Descriure les bases moleculars del plegament de proteïnes, de la seva dinàmica molecular, del seu processament post-traducciona i del seu trànsit intra- i extracel·lular.
- Saber establir relacions evolutives entre proteïnes i conèixer els mètodes d'anàlisi i de predicció estructural.
- Conèixer i saber com aplicar les metodologies més habituals per a la producció i purificació de proteïnes recombinants.
- Saber seleccionar estratègies per a la modificació i optimització de les propietats dels pèptids i de les proteïnes. Conèixer les bases per seu disseny, per la construcció de mini-, super-estructures i mimètics, i les metodologies utilitzades en aquests processos. També, conèixer aproximacions que hagin resultat vàlides per a formar nano-estructures i nano-sondes amb elles.
- Assolir una visió global de les relacions estructura-funció a proteïnes i de les aplicacions d'aquestes biomolècules a la medicina, la indústria i la recerca.
- Integrar els coneixements teòrics adquirits per interpretar els resultats d'experiments científics i per resoldre problemes experimentals, utilitzant la terminologia científica adequada.

Resultats d'aprenentatge

- KM43 (Identificar les propietats dinàmiques i funcionals que permeten els diversos nivells de plegament de les proteïnes.) Identificar les propietats dinàmiques i funcionals que permeten els diversos nivells de plegament de les proteïnes.
- SM34 (Dur a terme procediments bàsics d'enginyeria genètica i d'enginyeria de proteïnes.) Dur a terme procediments bàsics d'enginyeria genètica i d'enginyeria de proteïnes.

Continguts

TEORIA de l'assignatura QUÍMICA I ENGINYERIA DE PROTEÏNES

I. Propietats fonamentals dels aminoàcids i de les proteïnes.

Les proteïnes, els pèptids i les seves funcions als éssers viu. Estructura i propietats físico-químiques dels aminoàcids. Reactivitat química. Aportació diferencial dels aminoàcids a les propietats de les proteïnes i relacions evolutives.

II. L'enllaç peptídic i la seqüència polipeptídica.

Estereoquímica de l'enllaç peptídic. Tipus de pèptids. Reactivitat química a pèptids. Implicacions estructurals i funcionals de la seqüència polipeptídica. Estratègies per a la determinació de la seqüència de proteïnes. Síntesi química de pèptids; llibreries combinatorials.

III. Determinants conformationals. estructures secundàries.

Nivells d'estructuració tridimensional. Tipus de forces estabilitzadores de la conformació. Cooperativitat de les

interaccions febles. Condicionants del plegament de proteïnes. Tipus principals d'estructures secundàries; aminoàcids que hi participen.

IV. Classificació estructural de les proteïnes.

Estructures supersecundàries i motius. Dominis estructurals. Estructura terciària. Classificació de proteïnes globulars i els seus diferents mètodes. Conformació i funció a proteïnes fibroses: α -queratina, fibroïna, col·lagen. Bases de dades CATH i SCOP. Exemples de cerca i classificació.

V. Correlació estructura-funció a proteïnes. Exemples.

Funcions generals de les proteïnes. Proteïnes enzimàtiques: exemples. Proteïnes que s'uneixen a àcids nucleics: exemples. Motors moleculars: exemples. Proteïnes de membrana.

VI. Estructura quaternària de proteïnes.

Avantatges de l'adopció d'estructures quaternàries i factors que la governen. Protòmers i subunitats. Disposicions dels protòmers a l'espai; simetries. Exemples de proteïnes oligomèriques: relacions estructura-funció i regulació de l'activitat

VII. Determinació de l'estructura tridimensional de proteïnes.

Metodologies generals de caracterització estructural de proteïnes. Anàlisi en dissolució o en films: IR, DC, UV-Vis, fluorescència, RPE. Anàlisi en cristalls: raigs-X i ME. Espectroscòpia de RMN.

VIII. Plegament i dinàmica conformacional.

Plegament i desplegament de proteïnes: estat natiu i estat desplegat. Mètodes d'anàlisi del plegament. Característiques termodinàmiques i mecanístiques del procés de plegament. Models que el descriuen. Plegament i agregació; les malalties conformacionals. Plegament de proteïnes *in vivo*: les chaperones moleculars. Proteïnes intrínsecament desestructurades. Dinàmica molecular de proteïnes.

IX. Processos i modificacions post-traducció.

Tipus de modificacions post-traducció i implicacions funcionals. Transport i modificacions associades. Proteòlisi limitada: pre-proteïnes, zimògens. Degradació i recanvi proteic *in vivo*.

X. Interacció proteïna-ligand

Forces que intervenen. Mètodes d'estudi. Paràmetres cinètics. Disseny de fàrmacs.

XI. Enginyeria de proteïnes: disseny racional

Disseny racional: la mutagènesi dirigida com eina d'anàlisi i modificació de proteïnes. Exemples i aplicacions de l'enginyeria de proteïnes en l'anàlisi, modificació i millora de l'estructura, l'estabilitat, i la funcionalitat.

XII. Enginyeria de proteïnes: redisseny i síntesi de novo.

Modificació i millora de les propietats de les proteïnes. Evolució dirigida: enginyeria de proteïnes per mètodes combinatoris. Exemples de proteïnes recombinants. Disseny de proteïnes *de novo*.

Activitats formatives i Metodologia

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Problemes	22,5	0,9	KM43, SM34
Tutories	8	0,32	KM43, SM34
Estudi en general	61,5	2,46	KM43, SM34
Classes teòriques	34	1,36	KM43, SM34
Problemes	18	0,72	KM43, SM34

Les activitats formatives estan repartides en dos apartats: classes de teoria i classes de problemes i / o seminaris, cadascuna d'elles amb la seva metodologia específica. Aquestes activitats seran complementades per una sèrie de sessions de tutoria que es programaran addicionalment.

Classes de Teoria

El professor / a explicarà el contingut del temari amb el suport de material audiovisual que es posarà a disposició dels estudiants a l'aula Moddle de l'assignatura. Aquestes sessions expositives constituïran la part més important de l'apartat de teoria.

Classes de Problemes i / o Seminaris

Un conjunt d'enunciats de problemes de l'assignatura (relacionats amb els temes desenvolupats en Teoria) es

posarà a disposició dels alumnes i s'acumularà en forma de dossier al Campus Virtual, que s'aniran resolent al llarg de les sessions. Els estudiants treballaran els problemes fora de l'horari de classe de manera individual. Les sessions presencials no expositives es dedicaran a la resolució de problemes prèviament treballats durant la setmana anterior. Complementària o alternativament, es podran organitzar seminaris per proporcionar als alumnes aquest tipus de formació docent més viva i addicional a la de teoria.

Tutories

Es realitzaran a sol·licitud dels estudiants. L'objectiu d'aquestes sessions és el de resoldre dubtes, repassar conceptes amb una dificultat conceptual elevada i dur a terme debats sobre els temes del programa. Aquestes sessions no seran expositives ni en elles s'avançarà matèria del temari oficial, sinó que seran sessions de debat i discussió.

Nota: es reservaran 15 minuts d'una classe, dins del calendari establert pel centre/titulació, perquè l'alumnat completi 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 problemes	30%	3	0,12	KM43, SM34
Avaluació de teoria	70%	3	0,12	KM43, SM34

Teoria. L'avaluació principal d'aquesta part de l'assignatura tindrà el format d'avaluació continuada amb dues proves parcials (35% cada una d'elles), amb una altra prova final que permeti examinar-se del contingut de cadascun dels dos parcials no superats prèviament, o dels dos simultàniament, en cas de no superar cap dels parcials. L'objectiu de l'avaluació continuada és el d'incentivar l'esforç continuat de l'estudiant al llarg de tot el temari, permetent també que prengui consciència del seu grau de seguiment i comprensió de la matèria. Els alumnes que hagin superat els parcials de teoria i problemes amb una nota superior a 4,0 sobre 10 punts, poden optar per obtenir la nota promig dels dos parcials. Aquells que no hagin superat el valor de 4,0 de qualsevol dels dos parcial s'hauran d'examinar en la data fixada per l'examen final de l'assignatura del parcial o parcials en qüestió, en aquest cas la qualificació de l'últim examen parcial fet és la que es prendrà per calcular la qualificació final.

Problemes i/o Seminaris. El pes de l'avaluació d'aquest apartat serà del 30% del total : un 15% d'aquest total s'assignarà als lliuraments individuals dels problemes-exercicis i/o participació activa a classe, seminaris, i l'altre 15% serà pels exàmens particulars d'aquestes activitats, que tindran lloc en paral·lel als exàmens de Teoria.

Avaluació global. Es superarà l'assignatura quan la suma de les diferents parts ponderada pel seu pes específic en l'assignatura superi un 5,0 sobre 10 punts. Els estudiants als que no els sigui possible, amb causa justificada, participar a l'avaluació continuada, podran ésser avaluats mitjançant la prova final.

Per optar a la recuperació (examen final) cal haver-se presentat a 2/3 de les activitats avaluatives de l'assignatura.

Si l'alumne només ha estat avaluat com a màxim d'un 25% de les proves i abandona, la qualificació final serà de NO AVALUABLE.

AI: Ús prohibit: "En aquesta assignatura, no es permet l'ús de tecnologies d'Intel·ligència Artificial (IA) en cap de les seves fases. Qualsevol treball que inclogui fragments generats amb IA serà considerat una falta d'honestat acadèmica i pot comportar una penalització parcial o total en la nota de l'activitat, o sancions majors en casos de gravetat.

Avaluació Única:

L'avaluació única consisteix en una prova de síntesi única amb preguntes tipus test (pot incloure preguntes curtes) sobre els continguts de tot el programa de teoria (70%); així com 2 problemes per resoldre (30%).

La prova d'avaluació única es farà coincidint amb la mateixa data fixada en calendari per a la darrera prova d'avaluació contínua i s'aplicarà el mateix sistema de recuperació que per a l'avaluació contínua.

La realització de qualsevol irregularitat en un acte d'avaluació (fraud acadèmic, plagi o ús indegut de la IA, tret que aquest ús estigui autoritzat expressament a la guia docent), que pugui conduir a una variació significativa de la qualificació, suposa que aquest acte es qualificarà amb un 0. En cas que la guia docent prevegi que per superar l'assignatura sigui requisit imprescindible haver obtingut una nota mínima en aquest acte d'avaluació o que es produeixin diverses irregularitats en els actes d'avaluació d'una mateixa assignatura, la qualificació final d'aquesta assignatura és 0. Al marge d'això, es podrà instruir un procés disciplinari a l'estudiant que incorri en alguna d'aquestes irregularitats.

Bibliografia

Bàsica

- Brandén C. & Tooze J., Introduction to Protein Structure (1999) Garland Pub.
- Buxbaum E. Fundamentals of Protein Structure and Function (2007) Springer.
- Gómez-Moreno C y Sancho J. (eds.), Estructura de Proteínas (2003) Ariel Ciencia.
- Kessel A. & Ben-Tal N., Introduction to Proteins. Structure, Function and Motion (2011) CRC Press
- Petsko, R. & Ringe, D., Protein Structure and Function (Primers in Biology) (2008) Blackwell Publishing.
- Whitford, D., Proteins: Structure and Function (2005, 1ª edic / 2016, 2ª edic) Wiley.

Complementària

- Buckel, P. (ed), Recombinant Protein Drugs (2001), Birkhäuser Verlag
- Bujnicki, J.M. (ed.) Prediction of protein structure, functions and interactions (2008) Wiley
- Buxbaum, E., Fundamentals of Protein Structure and Function (2007), Springer
- Creighton T.E., Proteins. Structures and Molecular Properties. (1993) (2nd ed.) Freeman W.H. & Co.
- Fersht A. Structure and Mechanism in Protein Science (1999) W.H. Freeman & Co.
- Glick, B.R. & Pasternak, J.J. Molecular Biotechnology (1998) ASM Press
- Kamp, R.M., Calvete, J. J., Choli-Papadopoulou, T. Methods in Proteome and Protein Analysis (2004) Springer-Verlag
- Kraj, A. & Silberring, J. (eds) Introduction to Proteomics (2008) Wiley
- Lesk, A.M. Introduction to Protein Science (2010) Oxford University Press
- Lutz, S., Bornscheuer, U.T. (eds.) Protein Engineering Handbook (2008) Wiley
- Oxender D.L. i Fox C.F., Protein Engineering (1987) Alan Liss Inc.
- Patthy, L. Protein Evolution (2007) (2nd ed.) Wiley
- Perutz M., Protein Structure. New Approaches to Disease and Therapy. (1992). Freeman W.H. & Co.
- Schultz, G.E. & Schirmer, R.H. Principles of Protein Structure (1979) Springer Verlag
- Park, S.J., Cochran, J.R. Protein Engineering and design (2009) CRC Press.

- Remigopalakrishnan V., Carey P.R. & Smith I.C.P. Proteins : Structure, Dynamics & Design (2013).
- Sternberg M.J.E. Protein Structure Prediction. (1996) IRL- Oxford University Press.
- Twyman, R., Principles of Proteomics (2004) Taylor & Francis
- Veenstra, T.D. & Yates, J.R. Proteomics for Biological Discovery (2006) Wiley
- Walsh, G. Proteins: Biochemistry and Biotechnology (2001) Wiley

Llocs web generals i d'iniciació, cursos de Proteïnes i de Bioquímica estructural :

[Curs de proteïnes amb temaris, auto-tests, etc](#)

[Principles of Protein Structure Using the Internet](#)

[Bioquímica - Devlin](#)

[Protein explorer](#)

[Molecular Models for Biochemistry](#)

[P. Reisberg's Biochemistry pages](#)

[BioMolecules in the Classroom](#)

[Medical Biochemistry](#)

[BioROM](#)

Programari

PyMol: <https://pymol.org/2/>

JMol: <http://jmol.sourceforge.net/>

Grups i idiomes de l'assignatura

La informació proporcionada és provisional fins al 30 de novembre.
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

Tipus de docència	Grup	Idioma	Semestre	Torn
(TE) Teoria	1	Català	segon quadrimestre	matí-mixt
(PAUL) Pràctiques d'aula	1	Català	segon quadrimestre	matí-mixt