

Titulación	Tipo	Curso
Bioquímica	OP	4

Profesor/a de contacto

Nombre : Guillem Prats Ejarque

Correo electrónico : guillem.prats.ejarque@uab.cat

Equipo docente

Arnau Cordomi Montoya

Silvia Lope Piedrafita

Nuria Benseny Cases

Ester Boix Borrás

Equipo docente (externo a la UAB)

Xavier Carpena

Fernando Gil

Idiomas de los grupos

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

Prerrequisitos

El estudiantado debe haber superado las asignaturas Técnicas instrumentales básicas, Técnicas instrumentales avanzadas y Química e Ingeniería de proteínas.

Objetivos

El objetivo general de la asignatura es el estudio estructural y funcional de las macromoléculas biológicas.

La asignatura incluye una descripción de las técnicas actuales de resolución y predicción de la estructura tridimensional de macromoléculas biológicas, así como las metodologías experimentales y computacionales para el estudio de su comportamiento dinámico y funciones.

Se dará máxima prioridad a la aplicación práctica de la materia impartida, de modo que el alumnado pueda experimentar las técnicas descritas y simular el comportamiento de las macromoléculas y sus complejos en un contexto biológico.

Finalmente, el análisis estructural -funcional de macromoléculas y la predicción de complejos supramoleculares se aplicará a ejemplos prácticos de identificación de las bases moleculares de enfermedades y al diseño de fármacos.

Resultados de aprendizaje

- CM35 (Revisar las aplicaciones de las tecnologías emergentes asociadas a la radiación de sincrotrón y la nanotecnología en el área de la bioquímica para dar respuestas innovadoras a necesidades de la sociedad.) Revisar las aplicaciones de las tecnologías emergentes asociadas a la radiación de sincrotrón y la nanotecnología en el área de la bioquímica para dar respuestas innovadoras a necesidades de la sociedad.
- CM37 (Integrar los conocimientos de la bioquímica y la biología molecular con las tecnologías emergentes asociadas a la radiación de sincrotrón y la nanotecnología.) Integrar los conocimientos de la bioquímica y la biología molecular con las tecnologías emergentes asociadas a la radiación de sincrotrón y la nanotecnología.
- KM39 (Describir los fundamentos físicos y las aplicaciones de las técnicas espectroscópicas y de microscopía utilizadas en el análisis estructural y en el estudio de las biomoléculas y las membranas biológicas.) Describir los fundamentos físicos y las aplicaciones de las técnicas espectroscópicas y de microscopía utilizadas en el análisis estructural y en el estudio de las biomoléculas y las membranas biológicas.
- SM39 (Aplicar los recursos informáticos en el tratamiento de datos de técnicas espectroscópicas y de microscopías, así como en el cálculo de parámetros específicos.) Aplicar los recursos informáticos en el tratamiento de datos de técnicas espectroscópicas y de microscopías, así como en el cálculo de parámetros específicos.
- SM40 (Aplicar las técnicas espectroscópicas y de microscopía al estudio de las biomoléculas, biomembranas y nanopartículas.) Aplicar las técnicas espectroscópicas y de microscopía al estudio de las biomoléculas, biomembranas y nanopartículas.
- SM41 (Aplicar las normas generales de seguridad en la realización de técnicas espectroscópicas, así como las normativas específicas en la manipulación de material biológico y nanopartículas.) Aplicar las normas generales de seguridad en la realización de técnicas espectroscópicas, así como las normativas específicas en la manipulación de material biológico y nanopartículas.

Contenidos

TEORÍA

Tema 1. Aplicaciones biológicas de la radiación de sincrotrón

Introducción a la producción y características de la luz de sincrotrón. Microscopías de rayos X e infrarrojo: introducción a las técnicas y aplicaciones en biomedicina.

Tema 2. Técnicas microscópicas avanzadas

Criomicroscopia electrónica, criotomografía; determinación de la estructura de partículas únicas; microscopia electrónica de transmisión, microscopia electrónica de rastreo. Microscopia de fuerza atómica y de efecto túnel; espectroscopia de fuerzas; nanotribología. Aplicaciones en Biotecnología y Biomedicina.

Tema 3. Cristalografía de rayos X y aplicaciones

Fundamentos teóricos básicos de la determinación de la estructura tridimensional de macromoléculas por cristalografía y difracción de rayos X; métodos de cristalización; propiedades de los cristales; proceso de datos de difracción y reconstrucción del modelo 3D. Herramientas para el análisis de regiones funcionales en

macromoléculas.

Tema 4. Herramientas bioinformáticas para el análisis estructural de proteínas

Introducción a la bioinformática estructural. Comparación de secuencias y estructuras. Predicción de estructura proteica: estructuras secundarias, regiones transmembrana y métodos basados en inteligencia artificial (AlphaFold). Modelización por homología. Introducción a los campos de fuerza y a la dinámica molecular de biomoléculas. Estrategias de acoplamiento molecular y cribado virtual para estudiar interacciones macromolécula-ligando.

PROBLEMAS

Se propondrá la resolución de problemas prácticos que facilitarán la consolidación de los conceptos teóricos impartidos. Buena parte de las clases de problemas se impartirán en el aula de informática, donde se aplicarán entre otros programas de predicción y análisis estructural.

PRÁCTICAS

Se realizarán 3 bloques de Prácticas según el temario de la asignatura.

1er bloque (Temas 1 y 2)

Prácticas en el Servicio de Microscopía Electrónica: Análisis de muestras biológicas mediante microscopía óptica de alta resolución y microscopía electrónica de transmisión (tinción negativa y CrioTEM). Prácticas en el aula de informática SID: Resolución de estructuras por Microscopía Electrónica.

2º bloque (Tema 3)

Prácticas de resolución de estructuras tridimensionales por Cristalografía de rayos X en el aula de informática SID. Análisis de regiones funcionales en macromoléculas en el aula de informática SID.

3er bloque (Tema 4)

Visualización y análisis estructural: uso de PyMOL para explorar, representar y analizar estructuras de proteínas y complejos macromoleculares.

Modelización e interacciones moleculares: construcción de modelos tridimensionales y estudio de interacciones macromolécula-ligando mediante acoplamiento molecular. Dinámica molecular: introducción a la simulación de dinámica molecular para analizar la flexibilidad, estabilidad y comportamiento dinámico de biomoléculas.

SEMINARIO

Se prevé incluir un seminario especializado.

SALIDA DE CAMPO:

Visita guiada al laboratorio de Luz de sincrotrón ALBA. Seminario a cargo del Dr. Fernando Gil y explicación del funcionamiento de las estaciones: BL-09, Microscopia de rayos X; BL-11, Difracción no cristalina y BL-13, Cristalografía de macromoléculas.

Tutorías

Se podrán realizar sesiones de tutorías durante el semestre. El objetivo de estas sesiones es el de resolver dudas y repasar conceptos.

Actividades formativas y Metodología

Título	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Resolución de casos prácticos	41	1,64	SM39, SM40, SM41
Clases magistrales	30	1,2	CM35, CM37, KM39, SM39, SM40
Prácticas	9	0,36	SM39, SM40, SM41
Problemas	10	0,4	CM35, CM37, SM39, SM40
Trabajo autónomo	52,5	2,1	CM35, CM37, SM39

Clases de teoría

El profesor explicará los contenidos del programa con el apoyo de material audiovisual que estará disponible para los estudiantes en el Campus Virtual de la asignatura. Este material de apoyo se escribirá en catalán, castellano o inglés.

Opcionalmente, especialistas en el campo impartirán seminarios.

Clases de problemas

A lo largo del curso se destinarán 8 horas en clases de problemas. Las clases incluyen sesiones en la sala de ordenadores.

Prácticas

Se realizarán visitas guiadas a grandes instalaciones con equipos especializados. El protocolo de prácticas se colgará en el Moodle/Campus Virtual antes de la sesión práctica.

Las clases de prácticas incluirán también sesiones en el aula de informática.

Los alumnos deben presentarse a la práctica con el protocolo de prácticas (disponible en el Campus Virtual) impreso y leído previamente y un cuaderno para anotar observaciones y datos obtenidos.

Las prácticas, así como su evaluación, se llevarán a cabo individualmente o en grupos de dos personas. La

asistencia a prácticas es obligatoria, excepto en los casos que exista una razón justificada demostrable.

Tutorías

Se podrán realizar varias sesiones de tutoría durante el semestre. El objetivo de estas sesiones es resolver dudas y revisar conceptos con un alto nivel de dificultad.

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.

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
Evaluación Prácticas	15%	1	0,04	SM39, SM40, SM41
Evaluación Problemas	15%	1,25	0,05	CM37, SM39, SM40
Evaluación prueba teórica 1o +2o parcial	70%	5,25	0,21	CM35, CM37, KM39

La calificación se basará en los siguientes elementos:

- 1- Prueba final de contenido teórico: un máximo de 7 puntos
- 2- Presentación de informes de problemas: máximo 1,5 puntos
- 3- Participación en las prácticas: máximo 1,5 puntos

Se podrán incluir tareas para entregar de cualquiera de las tres tipologías (teoría, problemas y prácticas).

El contenido del curso se evaluará en dos parciales.

El peso proporcional en la nota final para cada uno de los temas será proporcional al número de horas impartidas por cada profesor.

El tema será superado cuando la nota final sea igual o mayor de 50 para un máximo de 100.

Otras consideraciones

Los estudiantes que no pueden asistir a una prueba de evaluación individual por una causa justificada

deberán proporcionar documentación oficial al Coordinador/a de la asignatura y tendrán derecho a realizar la prueba en cuestión en una fecha diferente.

Para participar en la recuperación, el alumnado debe haber estado previamente evaluado en un conjunto de actividades el peso de las cuales equivalga a un mínimo de dos terceras partes de la calificación total de la asignatura o módulo. Por tanto, el alumnado obtendrá la calificación de \"No Avaluable\" cuando las actividades de evaluación realizadas tengan una ponderación inferior al 67% en la calificación final.

Normativa para subir Nota:

Es posible mejorar la nota de los exámenes parciales en ocasión del examen de recuperación. Se considerará la segunda nota obtenida si esta es superior a la obtenida en la primera prueba.

En caso de que la nota obtenida en la segunda oportunidad sea inferior en 1 punto o más a la primera nota, se considera que la nota final es el promedio de las dos notas.

El estudiante tendrá 10 minutos al inicio de la prueba para decidir si desea o no realizar la prueba.

Para la adjudicación de la calificación de Matrícula de Honor se dará prioridad a las notes obtenidas en exámenes parciales.

Cálculo de la nota final

$$\text{Nota final} = 0,70 \cdot \text{Teoría} + 0.15 \cdot \text{Problemas} + 0.15 \cdot \text{Prácticas}$$

Para aprobar la asignatura la nota final debe ser ≥ 5

Evaluación única:

El alumnado que se acoja a la evaluación única debe realizar de forma presencial obligatoria todas las sesiones de prácticas de laboratorio, prácticas en el aula de informática y salida de campo (visita al sincrotrón).

La evaluación única consiste en una prueba de síntesis única (con preguntas de formato variable sobre los contenidos de las sesiones de todas las tipologías). Todas las tareas encargadas durante el curso deberán entregarse o durante la sesión correspondiente o el día del examen final.

La prueba de evaluación única se hará coincidiendo con la fecha fijada en el calendario del examen final para la evaluación continuada y se aplicará el mismo sistema de recuperación que para la evaluación continuada.

El cálculo de la nota final para los alumnos que pidan la evaluación única será el siguiente:

$$\text{Nota final} = 0,80 \cdot \text{Teoría} + 0.10 \cdot \text{Problemas} + 0.10 \cdot \text{Prácticas}$$

Fraude y uso indebido de la IA.

La realización de cualquier irregularidad en un acto de evaluación (fraude académico, plagio o uso indebido de la IA, salvo que dicho uso esté expresamente autorizado en la guía docente), que pueda conducir a una variación significativa de la calificación, supone que dicho acto se calificará con un 0. En caso de que la guía docente prevea que para superar la asignatura sea requisito imprescindible haber obtenido una nota mínima

en este acto de evaluación o que se produzcan diversas irregularidades en los actos de evaluación de una misma asignatura, la calificación final de dicha asignatura es 0. Además de ello, se podrá instruir un proceso disciplinario al estudiante que incurra en alguna de estas irregularidades.

Bibliografía

Enlaces 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

LIBROS

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.

Computational tools for Chemical Biology. [2018]. Editor: S. Martín-Santamaría. London. Chemical Biology series. Royal Society of Chemistry. ISBN: 978-1-78262-700-5. DOI: 10.1039/9781788010139.

Software

UCSF Chimera; CCP4i2; Coot, Phenix; Modeller, AutoDock, AlphaFold, Pymol, RosettaFold

Grupos e idiomas de la asignatura

La información proporcionada es provisional hasta el 30 de noviembre. 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

Tipo de docencia	Grupo	Idioma	Semestre	Turno
(TE) Teoría	34	Catalán	segundo cuatrimestre	mañana-mixto

(PAUL) Prácticas de aula	341	Catalán	segundo cuatrimestre	mañana-mixto
(PLAB) Prácticas de laboratorio	341	Catalán	segundo cuatrimestre	tarde
(SEM) Seminarios	341	Catalán	segundo cuatrimestre	mañana-mixto
(VEXT) Visites externes a entitats	341	Catalán	segundo cuatrimestre	tarde