

Titulación	Tipo	Curso
Bioinformática / Bioinformatics	OP	1

Profesor/a de contacto

Nombre : Xavier Daura Ribera

Correo electrónico : xavier.daura@uab.cat

Equipo docente

Natalia Sánchez Groot

Berta Carrasco Martinez

Ester Boix Borrás

Leonardo Pardo Carrasco

Jean-Didier Pierre Marechal

Angel Gonzalez Wong

Laura Masgrau Fontanet

Alex Peralvarez Marin

Oscar Conchillo Solé

Xavier Daura Ribera

Marc Ciruela Jardí

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.

Objetivos

Las proteínas son objeto de una investigación intensiva en diversos campos, que abarcan desde el diseño dirigido de fármacos hasta la ingeniería de nuevas enzimas para una biocatálisis industrial sostenible. En

estas áreas, el modelado molecular se ha convertido en una herramienta esencial y central para la investigación llevada a cabo tanto en la academia como en la industria. Este módulo proporciona al estudiantado los conocimientos teóricos y prácticos fundamentales necesarios para convertirse en científicos cualificados en este campo.

Concretamente, el módulo tiene como objetivo introducir a los estudiantes en:

- Los principios físicos subyacentes a las diferentes técnicas de modelado molecular.
- Los métodos fundamentales y de vanguardia aplicados en este campo.
- Las principales áreas de aplicación, con un énfasis especial en el diseño de fármacos.

Resultados de aprendizaje

- CA08 (Proponer soluciones bioinformáticas a problemas de interacción molecular basadas en el modelado estructural.) Proponer soluciones bioinformáticas a problemas de interacción molecular basadas en el modelado estructural.
- CA09 (Trabajar de forma colaborativa en el análisis e interpretación de datos estructurales en proyectos de bioinformática.) Trabajar de forma colaborativa en el análisis e interpretación de datos estructurales en proyectos de bioinformática.
- CA10 (Evaluar críticamente modelos moleculares aplicándolos en estudios de diseño de fármacos. .) Evaluar críticamente modelos moleculares aplicándolos en estudios de diseño de fármacos. .
- KA10 (Explicar los fundamentos de las técnicas experimentales y computacionales empleadas en el análisis estructural y funcional de proteínas, incluyendo el estudio comparativo de familias proteicas.) Explicar los fundamentos de las técnicas experimentales y computacionales empleadas en el análisis estructural y funcional de proteínas, incluyendo el estudio comparativo de familias proteicas.
- KA11 (Explicar el diseño y la utilidad de bases de datos moleculares, como el PDB o AlphaFold Protein Structure Database, en el estudio de interacciones proteína-ligando.) Explicar el diseño y la utilidad de bases de datos moleculares, como el PDB o AlphaFold Protein Structure Database, en el estudio de interacciones proteína-ligando.
- KA12 (Describir las relaciones estructura-actividad y los métodos de quimioinformática y modelado molecular aplicados al diseño y evaluación de fármacos.) Describir las relaciones estructura-actividad y los métodos de quimioinformática y modelado molecular aplicados al diseño y evaluación de fármacos.
- SA11 (Aplicar herramientas como Gaussian, AlphaFold, Modeller, LigandScout o Amber en el modelado y análisis de estructuras proteicas y sus interacciones.) Aplicar herramientas como Gaussian, AlphaFold, Modeller, LigandScout o Amber en el modelado y análisis de estructuras proteicas y sus interacciones.
- SA12 (Analizar estructuras tridimensionales e interacciones biomoleculares para la investigación de relaciones estructura-función.) Analizar estructuras tridimensionales e interacciones biomoleculares para la investigación de relaciones estructura-función.
- SA13 (Relacionar datos estructurales y funcionales en el diseño de estrategias computacionales de cribado virtual y desarrollo de fármacos.) Relacionar datos estructurales y funcionales en el diseño de estrategias computacionales de cribado virtual y desarrollo de fármacos.

Contenidos

MÓDULO 4: Estructura y Función de Proteínas y Diseño de Fármacos

Parte I: Modelización Molecular

Conceptos Básicos

Introducción

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

Exploración conformacional (métodos diferentes de MD: MC, GA, NMA)

Parte II: Determinación y Modelado de Estructura

Métodos para la caracterización de la estructura de proteínas

Cristalografía de rayos X

RMN (Resonancia Magnética Nuclear)

Microscopía crioelectrónica (Cryo-EM)

Modelización Estructural

Modelización por homología

AlphaFold

Parte III: Dinámica Molecular (MD)

Dinámica Molecular: Una Técnica Esencial

Conceptos básicos

MD en agua

MD en un entorno de membrana

Métodos coarse-grained

Scripting y análisis

Métodos de muestreo mejorado (metadinámica, GaMD, etc.)

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 (GPCR), proteínas transportadoras de membrana

Descriptores moleculares

ADME-Tox

Modelos de farmacóforo basados en el ligando o en la estructura

Técnicas de docking (acoplamiento molecular)

Docking proteína - ligando

Docking proteína - proteína

Cribado virtual

Aplicaciones de la MD en el diseño de fármacos

Actividades formativas y Metodología

Título	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Estudio individual	224	8,96	CA08, CA10, SA11, SA12, SA13
Resolución de problemas en clase y prácticas en el laboratorio computacional	40	1,6	CA08, CA09, CA10, SA11, SA12, SA13
Seminaris	2	0,08	CA10, SA13
Clases de teoría	32	1,28	CA08, CA10, KA10, KA11, KA12, SA13

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	CA08, CA09, CA10, SA13
Trabajos realizados y presentados por el alumnado (portfolio del estudiante)	50%	0	0	CA08, CA09, CA10, KA10, KA11, KA12, SA11, SA12, SA13
Tests individuales de teoría y práctica	40%	2	0,08	CA08, CA10, KA10, KA11, KA12, SA11, SA12, SA13

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.

La comisión de cualquier irregularidad en un acto de evaluación (fraude académico, plagio o uso indebido de la IA, a menos que este uso esté expresamente autorizado en la guía docente) que pueda conducir a una variación significativa de la calificación, supondrá 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 bien que se produzcan diversas irregularidades en los actos de evaluación de una misma asignatura, la calificación final de dicha asignatura será de 0. Al margen de esto, se podrá instruir un proceso disciplinario al estudiante que incurra en cualquiera de estas irregularidades.

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
VMD
Rasmol
Modeller
AlphaFold3
Gaussian
Gaussview
AMBER
AmberTools
GROMACS
LigandScout
DataWarrior
Jupyter Notebook
Python
grace

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
(TEm) Teoría (máster)	1	Inglés	primer cuatrimestre	mañana-mixto
(PLABm) Prácticas de laboratorio (máster)	1	Inglés	primer cuatrimestre	mañana-mixto
(SEMm) Seminarios (máster)	1	Inglés	primer cuatrimestre	mañana-mixto