



| Guía Docente          |  |                    |   |           |
|-----------------------|--|--------------------|---|-----------|
| Datos Identificativos |  |                    |   | 2015/16   |
| Asignatura (*)        | Dinámica e Estructura de Proteínas   |                    | Código  | 610441011 |
| Titulación            | Mestrado Universitario en Bioloxía Molecular , Celular e Xenética  |                    |   |           |
| Descritores           |  |                    |   |           |
| Ciclo                 | Período  | Curso              | Tipo  | Créditos  |
| Mestrado Oficial      | 2º cuatrimestre  | Primeiro           | Optativa  | 3         |
| Idioma                | CastelánInglés   |                    |   |           |
| Modalidade docente    | Presencial   |                    |   |           |
| Prerrequisitos        |  |                    |   |           |
| Departamento          | Bioloxía Celular e Molecular   |                    |   |           |
| Coordinación          | Becerra Fernandez, Manuel  | Correo electrónico | manuel.becerra@udc.es   |           |
| Profesorado           | Becerra Fernandez, Manuel<br>Cerdan Villanueva, Maria Esperanza<br>Lamas Maceiras, Mónica  | Correo electrónico | manuel.becerra@udc.es<br>esper.cerdan@udc.es<br>monica.lamas@udc.es |           |
| Web                   |  |                    |   |           |
| Descrición xeral      | Dentro do Máster en Bioloxía Molecular, Celular e Xenética, esta asignatura, ten como obxectivos coñecer e manexar os fundamentos teóricos e as aproximacións experimentais ao análise das propiedades físicas e químicas das macromoléculas biolóxicas, en especial as proteínas, co fin de relacionar as súas estruturas coa su función e actividade biolóxica. Estudaránse os conceptos necesarios para a descrición das estruturas, os métodos computacionais e experimentais utilizados para o seu estudio e os fundamentos teóricos que os xustifican. |                    |   |           |

| Competencias / Resultados do título |  |
|-------------------------------------|--|
| Código                              | Competencias / Resultados do título  |
| A3                                  | Capacidade de utilizar ferramentas Bioinformáticas a nivel de usuario  |
| A9                                  | Capacidade de comprender a estrutura, e función das proteínas a nivel individual e da proteómica, así como das técnicas necesarias para analizaras e estudar as súas interaccións con outras biomoléculas  |
| B2                                  | Capacidade de toma de decisións para a resolución de problemas: que sexan capaces de aplicar os coñecementos teóricos e prácticos adquiridos na formulación de problemas biolóxicos e a busca de solucións |
| B3                                  | Capacidade de xestión da información: reunir e interpretar datos, información e resultados relevantes, obter conclusións e emitir informes razoados sobre cuestións científicas e biotecnolóxicas          |
| B4                                  | Capacidade de organización e planificación do traballo: que sexan capaces de xestionar a utilización do tempo así como os recursos dispoñibles e organizar o traballo no laboratorio                       |
| C3                                  | Utilizar as ferramentas básicas das tecnoloxías da información e as comunicacións (TIC) necesarias para o exercicio da súa profesión e para a aprendizaxe ao longo da súa vida.                            |
| C8                                  | Valorar a importancia que ten a investigación, a innovación e o desenvolvemento tecnolóxico no avance socioeconómico e cultural da sociedade.  |

| Resultados da aprendizaxe   |     |                                     |     |
|---|-----|-------------------------------------|-----|
| Resultados de aprendizaxe   |     | Competencias / Resultados do título |     |
| Capacidade para comprender os conceptos e teorías relacionados coa dinámica das proteínas nas células | AI3 | BI2                                 | CM3 |
|   | AI9 |                                     | CM8 |
| Familiarización coas fontes bibliográficas e informáticas onde se pode obter información actualizada  | AI3 | BI2                                 | CM3 |
|   | AI9 |                                     | CM8 |
| Coñecer os sistemas para a determinación de estruturas mediante difracción de raios X                 | AI9 | BI2                                 | CM3 |
|   |     |                                     | CM8 |
| Coñecer diferentes programas informáticos para a representación de proteínas e o seu uso              | AI3 | BI2                                 | CM3 |
|   | AI9 |                                     | CM8 |



|  |            |     |     |
|--|------------|-----|-----|
| Coñecer as técnicas para determinar interaccións entre proteínas e das proteínas con outras biomoléculas e ligandos. | AI3<br>AI9 | B14 | CM8 |
| Capacidade de interpretar de modo crítico os datos dunha publicación dunha estrutura dunha proteína                  | AI3<br>AI9 | BI3 | CM3 |

| Contidos   |   |
|--|---|
| Temas  | Subtemas  |
| Clasificación estrutural das proteínas.  | Domínios de proteínas estruturais. Categorias de proteínas de acordo coa súa estrutura tridimensional. Proteínas alfa. Alfa Proteína / beta. Proteínas Beta. Clases estruturais de proteínas. Cath Clasificación. SCOP Clasificación. Clasificación DALI. Clasificación SMART.                              |
| Criterios para a elección dun método de purificación e caracterización preliminar.   | Técnicas cromatográficas: xel filtración, intercambio iónico, afinidade, interacción hidrofóbica. Estratexias de desinfección. Caracterización preliminar da conformación de proteínas: Aparición de compacidade. A estrutura secundaria e indicadores de estrutura terciaria. Cuantificación de proteínas. |
| Determinación experimental da estrutura de proteínas mediante difracción de raios X. | Técnicas de cristalización. Ferramentas e estratexias para facer os datos difracción. A interpretación dos difratogramas. A recollida de datos e modelo de refinamento molecular. Parámetros para estimar modelo de converxencia. Modeling.   |
| Interaccións entre biomoléculas.   | As interaccións de proteínas para a formación de complexos con proteínas e outros ligandos.<br>Métodos experimentais para determinar esas interaccións e súa estrutura. O método de dobre híbrido. Método Split-ubiquitina. GST-pull-down. Traste. Ensaio de EMSA. Ensaio chip. Outras metodoloxías         |

| Planificación             |                           |   |                         |              |
|---------------------------|---------------------------|---|-------------------------|--------------|
| Metodoloxías / probas     | Competencias / Resultados | Horas lectivas (presenciais e virtuais) | Horas traballo autónomo | Horas totais |
| Sesión maxistral          | A9                        | 16                                      | 24                      | 40           |
| Prácticas de laboratorio  | A9 B3 B2 B4 C8            | 6                                       | 9                       | 15           |
| Prácticas a través de TIC | A3 C3                     | 2                                       | 3                       | 5            |
| Proba mixta               | A9                        | 1                                       | 10                      | 11           |
| Atención personalizada    |                           | 4                                       | 0                       | 4            |

\*Os datos que aparecen na táboa de planificación son de carácter orientativo, considerando a heteroxeneidade do alumnado

| Metodoloxías              |  |
|---------------------------|--|
| Metodoloxías              | Descrición   |
| Sesión maxistral          | Presentación oral complementada polo uso de medios audiovisuais para a transmisión de coñecementos e facilitar a aprendizaxe   |
| Prácticas de laboratorio  | Metodoloxía que permite que os alumnos aprendan de forma eficaz a través de actividades prácticas (demostracións, simulacións, etc.) Teoría dun campo do coñecemento a través do uso da tecnoloxía da información e comunicacións. |
| Prácticas a través de TIC | TIC para ver modelos de estrutura de proteínas e experimentos de deseño de interacción.  |
| Proba mixta               | Combinación de cuestións de múltiple elección e preguntas curtas   |

| Atención personalizada |            |
|------------------------|------------|
| Metodoloxías           | Descrición |
|                        |            |



|   |  |
|---|--|
| Prácticas de laboratorio<br>Prácticas a través de TIC | A atención persoal que se describe en relación a estas metodoloxías concíbense como momentos de traballo do alumno en clase con profesor para implicar a participación obrigatoria para o alumno.<br>A forma eo momento en que se levou a cabo indícase en relación a cada unha das actividades ao longo do curso de acordo co plan de traballo do curso |
|---|--|

| Avaliación                |                           |  |               |
|---------------------------|---------------------------|--|---------------|
| Metodoloxías              | Competencias / Resultados | Descrición   | Cualificación |
| Sesión maxistral          | A9                        | Valorarase asistencia e participación activa   | 5             |
| Prácticas de laboratorio  | A9 B3 B2 B4 C8            | Evaluarase a asistencia regular e a participación activa nas prácticas de laboratorio. | 10            |
| Proba mixta               | A9                        | Proba relativa a coñecementos teóricos e prácticos                                     | 75            |
| Prácticas a través de TIC | A3 C3                     | Valorarase a asistencia e participación activa   | 10            |

| Observacións avaliación   |
|---|
| Podrán optar a MH os alumnos examinados na primeira oportunidade de Xuño. |

| Fontes de información      |   |
|----------------------------|---|
| <b>Bibliografía básica</b> | <ul style="list-style-type: none"><li>· Banaszak, L. J. (2000). Foundations of structural biology. Academic Press.</li><li>· Berg, J. M., Tymoczko, J. L., Stryer. L. (2003). BIOQUÍMICA. 5ª Edición. Reverté.</li><li>· Branden, C. &amp; Toozé, J. (1998). INTRODUCTION TO PROTEIN STRUCTURE. 2nd edition Garland Publishing, Inc, New York.</li><li>· Cerdán Villanueva, M. E. (2005). Curso avanzado de proteínas y ácidos nucleicos. Universidade da Coruña.</li><li>· Creighton, T. E. (1993). PROTEINS: STRUCTURES AND MOLECULAR PROPERTIES, 2nd edition. W.H. Freeman &amp; Company, New York.</li><li>· Gómez-Moreno, C. &amp; Sancho, J. (Coords). (2003). ESTRUCTURA DE PROTEÍNAS. Ariel Ciencia, Barcelona.</li><li>· Lesk, A. M. (2000). INTRODUCTION TO PROTEIN ARCHITECTURE. THE STRUCTURAL BIOLOGY OF PROTEINS. Oxford University Press, Oxford.</li><li>· Nelson, D. L., Cox, M. M. (2000). LEHNINGER PRINCIPLES OF BIOCHEMISTRY. Worth Publishers.</li><li>· Rodes, G. (2000). Crystallography. Made Crystal Clear. Academic Press.</li></ul> |



|                                    |   |
|------------------------------------|---|
| <b>Bibliografía complementaria</b> | <p>§ Carter, Jr., C.V. y Sweet, R. M. (1997). <i>Macromolecular Crystallography</i>, parts A and B. <i>Methods in Enzymology</i>, vols. 276 y 277. Academic Press. NY. § Casari, G., Sander, C., Valencia, A. (1995). A method to predict functional residues in proteins. <i>Nature Struct. Biol.</i>, 2: 171178. § Clore, G. M. y Gonenborg, A. M. (1998). New methods of structure refinement for macromolecular structure determination by NMR. <i>Proc. Natl. Acad. Sci.</i>, 95, 58915898. § Del Sol Mesa, A., Pazos, F., Valencia, A. (2003). Automatic methods for predicting functionally important residues. <i>J. Mol. Biol.</i>, 326: 12891302. § Ducruix, A., Giegé, R. (1999). <i>Crystallisation of Nucleic Acids and Proteins. A Practical Approach</i>, edn 2. Oxford University Press. Oxford. § Eyrich, V. A., MartiRenom, M. A., Przybylski, D., Madhusudhan, M.S., Fiser, A., Pazos, F., Valencia, A., Sali, A. y Rost, B. (2001). EVA: continuous automatic evaluation of protein structure prediction servers. <i>Bioinformatics</i>, 17: 12421243. § Ferentz, A.E. y Wagner, G. (2000). <i>NMR spectroscopy: a multifaceted approach to macromolecular structure</i>. <i>Quarter Rev. Biophys.</i> 33, 2965. § Fersht, A. R. (1999). <i>Structure and Mechanism in Protein Science</i>, Freeman and Co., NY. § Frank, J. (1996). <i>Three dimensional electron microscopy of macromolecular assemblies</i>. Academic Press, San Diego. § Harris, E. L. V. y Angel, S. (eds.) (1999): <i>Protein purification methods. A practical approach</i>. IRL Press. Oxford. § James, T. L., Dötsch, V. y Smith, U. (2001). <i>Nuclear Magnetic Resonance of Biological Macromolecules. Part A and B. Methods Enzymol.</i>, 338, Academic Press, San Diego. § Juan, D., Graña, O., Pazos, F., Fariselli, P., Casadio, R., Valencia, A. (2003). A neural network approach to evaluate Fold recognition results. <i>Proteins Mar 1,(4): 50, 600608.</i> § Kleanthous, C. (ed.) (2000). <i>Protein-Protein Recognition</i>. Oxford University Press, Oxford. § Mayo, K. H. y Daragan, U. A. (2003). <i>Protein dynamics using NMR relaxation</i>. World Scientific, Nueva Jersey. § McEwen, B. F. y Marcko, M. (2001). The emergence of electron tomography as an important tool for investigating cellular ultrastructure. <i>J. Histochem. Cytochem. Vol 49, 553563.</i> § McPherson, A. (2002). <i>Introduction to Macromolecular Crystallography</i>. John Wiley and Sons. Inc., NY. § Naomi, E. C. (2004). Turning Protein crystallisation from an art into a science. <i>Current Opinion in Structural Biology</i>, 14: 577583. § Sinha, N. y SmithGill, S. J. (2002). Protein structure to function via dynamics. <i>Protein Peptid Letters</i>, 9: 367377. § Van Heel, M. (2000). Single particle electron cryomicroscopy: towards atomic resolution. <i>Q. Rev. Biophys.</i> Vol. 33, 307369. § Igor Stagljar and Stanley Fields (2002). Analysis of membrane protein interactions using yeast-based technologies ? REVIEW . <i>Trends in Biochemical Sciences</i>, 27: 559-563. § Sandor Vajda and Carlos J. Camacho (2004). Protein-protein docking: is the glass half-full or half-empty? <i>Trends in Biotechnology</i>, 22: 110-116. § Dobrin Nedelkov and Randall W. Nelson (2003). Surface plasmon resonance mass spectrometry: recent progress and outlooks ? REVIEW <i>Trends in Biotechnology</i>, 21: 301-305. § Takashi Ito, Tomoko Chiba and Mikio Yoshida (2001). Exploring the protein interactome using comprehensive two-hybrid projects ? REVIEW . <i>Trends in Biotechnology</i>, 19 (Supplement 1): 23-27. § Valerio Orlando (2000). Mapping chromosomal proteins in vivo by formaldehyde-crosslinked-chromatin immunoprecipitation ? REVIEW . <i>Trends in Biochemical Sciences</i>, 25: 99-104. § Dobrin Nedelkov and Randall W. Nelson (2003) Surface plasmon resonance mass spectrometry: recent progress and outlooks ? REVIEW . <i>Trends in Biotechnology</i>, 21: 301-305. § Philippe I. H. Bastiaens and Rainer Pepperkok (2000). Observing proteins in their natural habitat: the living cell ? REVIEW . <i>Trends in Biochemical Sciences</i>, 25: 631-637</p> <p>Coordenadas: Protein Data Bank: <a href="http://www.rcsb.org/pdb">http://www.rcsb.org/pdb</a> BioMagResBank: <a href="http://www.brmb.wisc.edu">http://www.brmb.wisc.edu</a> Cambridge Crystall Data Centre: <a href="http://www.ccdc.cam.ac.uk">http://www.ccdc.cam.ac.uk</a> Molecular Modelling DataBase: <a href="http://www.ncbi.nlm.nih.gov/structure">http://www.ncbi.nlm.nih.gov/structure</a> Nucleic Acid Database: <a href="http://ndbserver.rutgers.edu:80/">http://ndbserver.rutgers.edu:80/</a> MOOSE: <a href="http://db2.sdsc.edu/moose">http://db2.sdsc.edu/moose</a> Molecules To Go ("R US"): <a href="http://molbio.info.nih.gov/cgi-bin/pdb">http://molbio.info.nih.gov/cgi-bin/pdb</a> Enzyme Structures Database: <a href="http://www.ebi.ac.uk/thornton-srv/databases/enzymes">http://www.ebi.ac.uk/thornton-srv/databases/enzymes</a> Clasificación estructural CATH <a href="http://www.biochem.ucl.ac.uk/bsm/cath">http://www.biochem.ucl.ac.uk/bsm/cath</a> SCOP <a href="http://scop.mrc-lmb.cam.ac.uk/scop">http://scop.mrc-lmb.cam.ac.uk/scop</a> FSSP <a href="http://www2.embl-ebi.ac.uk/dali/fssp">http://www2.embl-ebi.ac.uk/dali/fssp</a> Programas de visualización molecular: Rasmol: <a href="http://www.umass.edu/microbio/rasmol">http://www.umass.edu/microbio/rasmol</a> Swiss-PdbViewer: <a href="http://www.expasy.ch/spdbv/">http://www.expasy.ch/spdbv/</a> MOLMOL <a href="http://www.mol.biol.ethz.ch/wuthrich/software/molmol">http://www.mol.biol.ethz.ch/wuthrich/software/molmol</a> Cn3D <a href="http://www.ncbi.nlm.nih.gov/Structure/CN3D/cn3d.shtml">http://www.ncbi.nlm.nih.gov/Structure/CN3D/cn3d.shtml</a> Chime <a href="http://www.umass.edu/microbio/chime">http://www.umass.edu/microbio/chime</a> Servidores de alineamientos de secuencias: BLAST <a href="http://www.ncbi.nlm.nih.gov/BLAST">http://www.ncbi.nlm.nih.gov/BLAST</a> FASTA <a href="http://www.ebi.ac.uk/fasta33">http://www.ebi.ac.uk/fasta33</a> Servidores de predicción y modelización: SWISS-MODEL <a href="http://expasy.ch/swissmod/">http://expasy.ch/swissmod/</a> The PredictProtein Server <a href="http://www.embl-heidelberg.de/predictprotein/predictprotein.html">http://www.embl-heidelberg.de/predictprotein/predictprotein.html</a> Center for Molecular Modeling: <a href="http://cmm.info.nih.gov/modeling/">http://cmm.info.nih.gov/modeling/</a> GRAMM: <a href="http://reco3.musc.edu/gramm/">http://reco3.musc.edu/gramm/</a> PQS (Probable Quat. Structure): <a href="http://msd.ebi.ac.uk/services/quaternary/quaternary.html">http://msd.ebi.ac.uk/services/quaternary/quaternary.html</a></p> |
|------------------------------------|---|



## Recomendacións

### Materias que se recomenda ter cursado previamente

Técnicas Moleculares/610441002  
Biología Celular Avanzada/610441003

### Materias que se recomenda cursar simultaneamente

Proteínas Recombinantes e Inxeniería de Proteínas/610441012  
Proteómica/610441013  
Bioinformática e Modelado de Biomoléculas/610441020

### Materias que continúan o temario

Traballo de Máster/610441022

### Observacións

(\*A Guía docente é o documento onde se visualiza a proposta académica da UDC. Este documento é público e non se pode modificar, salvo casos excepcionais baixo a revisión do órgano competente dacordo coa normativa vixente que establece o proceso de elaboración de guías