



| Guía Docente          |   |                    |   |          |
|-----------------------|---|--------------------|---|----------|
| Datos Identificativos |   |                    |   | 2016/17  |
| 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. Estudiaranse 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 |     |     |
|   | AI3                                 | BI2 | CM3 |
| Capacidade para comprender os conceptos e teorías relacionados coa dinámica das proteínas nas células | 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                        | 14                                      | 28                      | 42           |
| Prácticas de laboratorio  | A9 B3 B2 B4 C8            | 5                                       | 7.5                     | 12.5         |
| Prácticas a través de TIC | A3 C3                     | 2                                       | 3                       | 5            |
| Proba mixta               | A9                        | 1                                       | 13                      | 14           |
| Atención personalizada    |                           | 1.5                                     | 0                       | 1.5          |

\*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  | 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.  |
| Prácticas a través de TIC | A forma eo momento en que se levou a cabo indicase en relación a cada unha das actividades ao longo do curso de acordo co plan de traballo do curso<br>Para o alumnado con recoñecemento de dedicación a tempo parcial e dispensa académica de exención de asistencia, o profesor adoptará as medidas que considere oportunas para non perxudicar a súa cualificación. |

| Avaliación                |                           |  |               |
|---------------------------|---------------------------|--|---------------|
| Metodoloxías              | Competencias / Resultados | Descrición   | Cualificación |
| Prácticas de laboratorio  | A9 B3 B2 B4 C8            | Evaluarase a asistencia regular e a participación activa nas prácticas de laboratorio. Para os alumnos en modalidade semipresencial con causas xustificadas para non poder asistir ás prácticas deberán entregar un informe de prácticas coas metodoloxías empregadas nelas. Para os alumnos en modalidade semipresencial que non teñan unha causa xustificada de non poder asistir as prácticas terán un cero neste apartado. | 15            |
| Proba mixta               | A9                        | Proba relativa a conocimientos teóricos e prácticos  | 75            |
| Prácticas a través de TIC | A3 C3                     | Valorarase a asistencia e participación activa. Para os alumnos en modalidade semipresencial con causas xustificadas para non poder asistir ás prácticas de TIC deberán entregar un pequeno cuestionario sobre as prácticas a través de TIC realizadas. Para os alumnos en modalidade semipresencial que non teñan unha causa xustificada de non poder asistir as prácticas a través de TIC terán un cero neste apartado.      | 10            |

| Observacións avaliación  |
|--|
| Podrán optar a MH os alumnos examinados na primeira oportunidade de Xuño.<br>Para o alumnado con recoñecemento de dedicación a tempo parcial e dispensa académica de exención de asistencia, o profesor adoptará as medidas que considere oportunas para non perxudicar a súa cualificación. |

| Fontes de información      |   |
|----------------------------|---|
| <b>Bibliografía básica</b> | Banaszak, L. J. (2000). Foundations of structural biology. Academic Press. Berg, J. M., Tymoczko, J. L., Stryer. L. (2003). BIOQUÍMICA. 5ª Edición. Reverté. Branden, C. & Tooze, J. (1998). INTRODUCTION TO PROTEIN STRUCTURE. 2nd edition Garland Publishing, Inc, New York. Cerdán Villanueva, M. E. (2005). Curso avanzado de proteínas y ácidos nucleicos. Universidade da Coruña. Creighton, T. E. (1993). PROTEINS: STRUCTURES AND MOLECULAR PROPERTIES, 2nd edition. W.H. Freeman & Company, New York. Gómez-Moreno, C. & Sancho, J. (Coords). (2003). ESTRUCTURA DE PROTEÍNAS. Ariel Ciencia, Barcelona. Lesk, A. M. (2000). INTRODUCTION TO PROTEIN ARCHITECTURE. THE STRUCTURAL BIOLOGY OF PROTEINS. Oxford University Press, Oxford. Nelson, D. L., Cox, M. M. (2000). LEHNINGER PRINCIPLES OF BIOCHEMISTRY. Worth Publishers. Rodes, G. (2000). Crystallography. Made Crystal Clear. Academic Press. |



|                                    |   |
|------------------------------------|---|
| <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  
Bioloxía 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