



| Guía Docente          |  |                    |   |          |
|-----------------------|--|--------------------|---|----------|
| Datos Identificativos |  |                    |   | 2021/22  |
| Asignatura (*)        | Dinámica e Estructura de Proteínas   | Código             | 610441012s  |          |
| Titulación            | Máster Universitario en Bioloxía Molecular, Celular e Xenética (semipresencial)  |                    |   |          |
| Descritores           |  |                    |   |          |
| Ciclo                 | Período  | Curso              | Tipo  | Créditos |
| Mestrado Oficial      | 2º cuatrimestre  | Primeiro           | Optativa  | 3        |
| Idioma                | CastelánInglés   |                    |   |          |
| Modalidade docente    | Híbrida  |                    |   |          |
| Prerrequisitos        |  |                    |   |          |
| Departamento          | BioloxíaDepartamento profesorado máster  |                    |   |          |
| Coordinación          | Becerra Fernandez, Manuel  | Correo electrónico | manuel.becerra@udc.es   |          |
| Profesorado           | Becerra Fernandez, Manuel<br>Cerdan Villanueva, Maria Esperanza<br>De Castro De Antonio, María Eugenia<br>Lamas Maceiras, Mónica<br>Vizoso Vázquez, Ángel José   | Correo electrónico | manuel.becerra@udc.es<br>esper.cerdan@udc.es<br>m.decastro@udc.es<br>monica.lamas@udc.es<br>a.vizoso@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 estudo e os fundamentos teóricos que os xustifican. |                    |   |          |
| Plan de continxencia  | Non procede plan de continxencia xa que as actividades previstas non o requiren  |                    |   |          |

| 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                       |
| C2                                  | Capacidade para coñecer e empregar axeitadamente a terminoloxía técnica do campo de coñecemento do máster, na lingua nativa e en inglés, como lingua de difusión internacional neste campo                 |
| C3                                  | Capacidade de 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<br>AI9 | BI2 | CM2<br>CM3<br>CM8 |
| Coñecer os sistemas para a determinación de estruturas mediante difracción de raios X                                | AI9        | BI2 | CM3<br>CM8        |
| Coñecer diferentes programas informáticos para a representación de proteínas e o seu uso                             | AI3<br>AI9 | BI2 | CM3<br>CM8        |
| Coñecer as técnicas para determinar interaccións entre proteínas e das proteínas con outras biomoléculas e ligandos. | AI3<br>AI9 | BI4 | CM8               |
| Capacidade de interpretar de modo crítico os datos dunha publicación dunha estrutura dunha proteína                  | AI3<br>AI9 | BI3 | CM2<br>CM3        |

| Contidos   |   |
|--|---|
| Temas  | Subtemas  |
| Clasificación estrutural das proteínas.  | Dominios de proteínas estruturais. Categorías 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 C2                     | 1                                       | 41                      | 42           |
| Estudo de casos           | A9 B2 B3 B4 C8            | 1                                       | 9                       | 10           |
| Prácticas a través de TIC | A3 C3                     | 1                                       | 3                       | 4            |
| Proba mixta               | A9                        | 2                                       | 12                      | 14           |
| Atención personalizada    |                           | 5                                       | 0                       | 5            |

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

| Metodoloxías              |  |
|---------------------------|--|
| Metodoloxías              | Descrición   |
| Sesión maxistral          | O estudantado poderá asistir de xeito síncrono a través de TEAMS ás sesións presenciais. As sesións quedarán gravadas para a súa visualización de xeito asíncrono. |
| Estudo de casos           | Consistirán en simulacións e traballos empregando a metodoloxía de aprendizaxe baseado en problemas.   |
| 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  |
|---|---|
| Estudo de casos<br>Prácticas a través de<br>TIC | A atención persoal que se describe en relación a estas metodoloxías concíbense como momentos de traballo do alumno co profesor a través de TEAMS polo que implican unha participación obrigatoria para o alumno.<br>A forma e o momento en que se leva 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 |
|------------------------------|---------------------------|--|---------------|
| Estudo de casos              | A9 B2 B3 B4 C8            | Os estudantes terán que responder uns cuestionarios en base ao estudo de caso plantexado.  | 15            |
| Proba mixta                  | A9                        | Proba relativa a coñecementos teóricos e prácticos. Os alumnos en modalidade semipresencial ademais de superar a proba mixta deberán entregar unha serie de tarefas que se lle irán pedindo ao longo do curso. | 75            |
| Prácticas a través de<br>TIC | A3 C3                     | Os alumnos en modalidade semipresencial poderán realizar as prácticas a través de TIC pola súa conta e entregar unha memoria/informe do traballo realizado.  | 10            |

### Observacións avaliación

|  |
|--|
| <p>Podrán optar a MH os alumnos examinados na primeira oportunidade de Xuño.</p> <p>Para ós/ás estudantes que soliciten a CONVOCATORIA ADIANTADA DE DECEMBRO, aplicarase a normativa vixente, segundo a cal rixe a guía docente do curso en vigor.</p> <p>Implicacións do PLAXIO na cualificación: Aplicarase a normativa vixente, segundo a cal a realización fraudulenta das probas ou actividades de avaliación implicará directamente a cualificación de suspenso.</p> |
|--|

### 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/610441013  
Proteómica/610441014  
Bioinformática e Modelado de Biomoléculas/610441021

### Materias que continúan o temario

Traballo de Máster/610441023

### Observacións

Programa Green Campus Facultade de Ciencias Para axudar a conseguir unha contorna inmediata sustentable e cumprir co punto 6 da "Declaración Ambiental da Facultade de Ciencias (2020)", os traballos documentais que se realicen nesta materia solicitaranse en formato virtual e soporte informático.

(\*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