



FICHA IDENTIFICATIVA

DATOS DE LA ASIGNATURA

Código: 42588
Nombre: Bioinformática estructural
Ciclo: Máster Universitario Oficial
Créditos ECTS: 3
Curso académico: 2025-26

TITULACIONES

Titulación	Centro	Curso	Periodo
2116 - Máster Universitario en Bioinformática	Escola Tècnica Superior d'Enginyeria	1	Segundo cuatrimestre

MATERIAS

Titulación	Materia	Carácter
2116 - Máster Universitario en Bioinformática	Bioinformática estructural	OBLIGATORIA

COORDINACIÓN

ARNAU LLOMBART VICENTE

RESUMEN

En esta asignatura se presentarán los conocimientos teóricos y prácticos necesarios para la determinación estructural de las principales biomoléculas: proteínas y ácidos nucleicos. Se promoverá la búsqueda de datos, la caracterización, el análisis y la visualización de estructuras; así como la predicción y modelado de interacciones moleculares. Además se estudiarán y debatirán casos reales de aplicación directa de la Bioinformática Estructural.

CONOCIMIENTOS PREVIOS

RELACIÓN CON OTRAS ASIGNATURAS DE LA MISMA TITULACIÓN

No se han especificado restricciones de matrícula con otras asignaturas del plan de estudios.

OTROS TIPOS DE REQUISITOS

No hay.
Se recomienda tener conocimientos básicos en Python y bash.

COMPETENCIAS / RESULTADOS DE APRENDIZAJE



-

Desarrollar la iniciativa personal y ser capaces de realizar una toma rápida y eficaz de decisiones en su labor profesional y/o investigadora.

Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.

Que los/las estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo

Que los/las estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios.

Que los/las estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.

Que los/las estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.

Ser capaces de acceder a herramientas de información en otras áreas del conocimiento y utilizarlas apropiadamente.

Ser capaces de acceder a la información necesaria (bases de datos, artículos científicos, etc.) y tener suficiente criterio para su interpretación y empleo.

Ser capaces de valorar la necesidad de completar su formación científica, histórica, en lenguas, en informática, en literatura, en ética, social y humana en general, asistiendo a conferencias o cursos y/o realizando actividades complementarias, autoevaluando la aportación que la realización de estas actividades supone para su formación integral.

Trabajar en equipo con eficiencia en su labor profesional y/o investigadora y con personas de diferente procedencia.

DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

1. Estructura y biofísica de ácidos nucleicos y proteínas

- Estudio de los diferentes niveles estructurales definidos en proteínas y ácidos nucleicos (específicamente en ADN) y su importancia a nivel funcional. Dinamismo molecular.
- Análisis y estudio de las principales técnicas experimentales aplicadas a la determinación de estructuras proteínas(cristalografía de rayos X, resonancia magnética nuclear,etc) y de ácidos nucleicos (técnicas de microscopia de alta resolución y biología molecular).
- Estudio de aplicaciones reales de modelados 3D y toma de contacto con las principales metodologías computaciones aplicadas a la predicción y modelado estructural.



2. Bases de datos de estructura de proteínas, ácidos nucleicos y pequeñas moléculas

- Acceso y análisis de los principales repositorios existentes de estructura de proteínas, ácidos nucleicos y pequeñas moléculas.
- Estudio de los principales formatos de almacenamiento de información estructural y funcional de biomoléculas (PDB, mmCIF, XML, BED)

3. Alineamiento y clasificación de estructura

- Estudio, validación y optimización de los diferentes tipos de alineamientos estructurales existentes, basados en la estructura y/o en la secuencia. Evaluación de los alineamientos estructurales.
- Conceptos básicos del modelado de zonas intrínsecamente desordenadas y con cierto grado de libertad: modelado de bucles.

4. Genómica estructural

Necesitamos conocer estructuras no determinadas experimentalmente de secuencias conocidas de genes y proteínas. La genómica estructural se ocupa de generar y analizar estas formas tridimensionales.

5. Predicción de estructura tridimensional de ácidos nucleicos y proteínas.

Nos centraremos en la predicción de estructura tridimensional de ácidos nucleicos y proteínas

6. Docking de pequeñas molecular en la superficie de estructuras de proteínas.

Estudiaremos el acoplamiento molecular o Docking de pequeñas molecular en la superficie de estructuras de proteínas.

7. Aplicaciones para el desarrollo de nuevos fármacos

Uno de los principales objetivos de la Bioinformática estructural es su aplicación al desarrollo de nuevos fármacos. Analizaremos esta posibilidad con las técnicas vista en esta materia.

VOLUMEN DE TRABAJO (HORAS)

ACTIVIDADES PRESENCIALES

Actividad	Horas
Teoría	10,50



Laboratorio	4,50
Total horas	15,00

ACTIVIDADES NO PRESENCIALES

Actividad	Horas
Asistencia a otras actividades	2,00
Elaboración de trabajos individuales o en grupo	2,00
Estudio y trabajo autónomo	22,00
Preparación de clases	13,50
Preparación de actividades de evaluación	6,00
Resolución de casos prácticos	9,00
Total horas	54,50

METODOLOGÍA DOCENTE

MD1 - Tareas formativas del proceso de enseñanza-aprendizaje entorno a la interacción en el aula mediante sesiones expositivas. Incluyen las tareas previas de preparación (búsqueda de información, lectura de textos facilitados por el profesorado), las propias sesiones lectivas y el trabajo posterior de profundización.

MD2 – Aprendizaje mediante resolución de problemas y casos de estudio, a través de los cuales se va adquiriendo competencias sobre los diferentes aspectos de las materias y asignaturas.

MD3 - Actividades prácticas de laboratorio. Incluyen preparación, realización de las prácticas con el seguimiento y apoyo del profesorado, trabajo autónomo on-line y elaboración de informes de las prácticas.

MD4 - Competencias transversales. Incluyen asistencia a cursos, conferencias o mesas redondas organizadas por la CCA del Máster y/o realización de un trabajo bibliográfico sobre temas que contribuyan a la formación integral. Se elabora una memoria de las actividades

EVALUACIÓN

En las dos convocatorias:

SE1 Evaluación continua: 5%.

SE3 Laboratorio: 55%.

SE4 Exámenes: 40%.

BIBLIOGRAFÍA

Thomas E. Creighton. Proteins: Structures and Molecular Properties. W. H. Freeman (ed); 2 Sub edition (August 15, 1992). ISBN-10: 071677030X



Gregory A. Petsko & Dagmar Ringe. Protein Structure and Function. Sinauer Associates (eds) (January 2004). ISBN-10: 0878936637

Structural Bioinformatics, 2nd ed. (2009). Eds. Gu, J. & Bourne, P.E. John Wiley & Sons, New Jersey.

Introduction to Protein Structural Bioinformatics (2018). K. Anton Feenstra, Sanne Abeln. bioRxiv: 1801.09442 <https://doi.org/10.48550/arXiv.1801.09442>

Kessel, A., & Ben-Tal, N. (2018). Introduction to Proteins: Structure, Function, and Motion, Second Edition (2nd ed.). Chapman and Hall/CRC.

Florencio Pazos & Mónica Chagoyen. Practical Protein Bioinformatics. Springer. (January 2015). ISBN 978-3-319-12727-9

Michael Eisenstein (2021). Artificial intelligence powers protein-folding predictions. Nature. 7886(599):706-708.