

**FITXA IDENTIFICATIVA****DADES DE L'ASSIGNATURA****Codi:** 42588**Nom:** Bioinformàtica estructural**Cicle:** Màster Universitari Oficial**Crèdits ECTS:** 3**Curs acadèmic:** 2025-26**TITULACIONS**

| Titulació | Centre | Curs | Període |
|--|--------------------------------------|------|--------------------|
| 2116 - Màster Universitari en Bioinformàtica | Escola Tècnica Superior d'Enginyeria | 1 | Segon quadrimestre |

MATÈRIES

| Titulació | Matèria | Caràcter |
|--|----------------------------|-------------|
| 2116 - Màster Universitari en Bioinformàtica | Bioinformàtica estructural | OBLIGATÒRIA |

COORDINACIÓ

ARNAU LLOMBART VICENTE

RESUM

S'estudiaran les tècniques bàsiques d'anàlisi i predicció d'estructura d'àcids nucleics i proteïnes. Dins del curs es donarà una panoràmica general de les eines i les bases de dades més usades en la Bioinformàtica estructural.ural.

CONEIXEMENTS PREVIS**RELACIÓ AMB ALTRES ASSIGNATURES DE LA MATEIXA TITULACIÓ**

No s'ha especificat restriccions de matrícula amb altres assignatures del pla d'estudis.

ALTRES TIPUS DE REQUISITS

No hi ha

COMPETÈNCIES / RESULTATS D' APRENENTATGE

-



Desenvolupar la iniciativa personal i ser capaces de realitzar una presa ràpida i eficaç de decisions en la seua labor professional i/o investigadora.

Posseir i comprendre coneixements que aportin una base o oportunitat de ser originals en el desenvolupament i / o aplicació d'idees, sovint en un context de recerca.

Que els estudiants posseïsquen les habilitats d'aprenentatge que els permeten continuar estudiant d'una forma que haurà de ser en gran manera autodirigida o autònoma.

Que els estudiants sàpiguen aplicar els coneixements adquirits i la seua capacitat de resolució de problemes en entorns nous o poc coneguts dins de contextos més amplis (o multidisciplinaris) relacionats amb la seua àrea d'estudi.

Que els estudiants sàpiguen comunicar les conclusions (i els coneixements i les raons últimes que les sustenten) a públics especialitzats i no especialitzats d'una manera clara i sense ambigüitats.

Que els estudiants siguen capaços d'integrar coneixements i afrontar la complexitat de formular judicis a partir d'una informació que, sent incompleta o limitada, incloga reflexions sobre les responsabilitats socials i ètiques vinculades a l'aplicació dels seus coneixements i judicis.

Ser capaços d'accedir a ferramentes d'informació en altres àrees del coneixement i utilitzar-les apropiadament.

Ser capaços d'accedir a la informació necessària (bases de dades, articles científics, etc.) i tenir prou criteri per a la seua interpretació i utilització.

Ser capaços de valorar la necessitat de completar la seua formació científica, històrica, en llengües, en informàtica, en literatura, en ètica, social i humana en general, assistint a conferències o cursos i / o realitzant activitats complementàries, autoavaluant l'aportació que la realització d'aquestes activitats suposa per a la seua formació integral.

Treballar en equip amb eficiència en la seua labor professional y/o investigadora i amb persones de diferent procedència.

DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1. Estructura i biofísica d'àcids nucleics i proteïnes.

Estructura i biofísica d'àcids nucleics i proteïnes. Conceptes bàsics de cristal·lografia i obtenció de l'estructura de proteïnes per difracció de raigs X o RMN

2. Bases de dades d'estructura de proteïnes, àcids nucleics i petites molècules

S'accedirà a bases de dades d'estructura de proteïnes, àcids nucleics i petites molècules.



3. Alineament i classificació d'estructura

Un alineament estructural és un tipus d'alineament de seqüències basat en la comparació de la forma. Estudiarem aquests conceptes.

4. Genòmica estructural

Necessitem conèixer estructures no determinades experimentalment de seqüències conegudes de gens i proteïnes. La genòmica estructural s'ocupa de generar i analitzar aquestes formes tridimensionals.

5. Predicció d'estructura tridimensional d'àcids nucleics i proteïnes.

Ens centrarem en la predicció d'estructura tridimensional d'àcids nucleics i proteïnes.

6. Docking de petites molecular en la superfície d'estructures de proteïnes.

Estudiarem l'acoblament molecular o Docking de petites molecular en la superfície d'estructures de proteïnes.

7. Aplicacions per al desenvolupament de nous fàrmacs

Un dels principals objectius de la bioinformàtica estructural és la seva aplicació al desenvolupament de nous fàrmacs. Analitzarem aquesta possibilitat amb les tècniques vista en aquesta matèria.

VOLUM DE TREBALL (HORES)

ACTIVITATS PRESENCIALS

| Activitat | Hores |
|--------------------|--------------|
| Teoria | 10,50 |
| Laboratori | 4,50 |
| Total hores | 15,00 |

ACTIVITATS NO PRESENCIALS

| Activitat | Hores |
|--|-------|
| Assistència a altres activitats | 2,00 |
| Elaboració de treballs individuals o en grup | 2,00 |
| Estudi i treball autònom | 22,00 |
| Preparació de classes | 13,50 |



| | |
|-------------------------------------|--------------|
| Preparació d'activitats d'avaluació | 6,00 |
| Resolució de casos pràctics | 9,00 |
| Total hores | 54,50 |

METODOLOGIA DOCENT

MD1 - Tasques formatives del procés d'ensenyament-aprenentatge entorn a la interacció a l'aula mitjançant sessions expositives. Inclouen les tasques prèvies de preparació (recerca d'informació, lectura de textos facilitats pel professorat), les pròpies sessions lectives i el treball posterior d'aprofundiment.

MD2 - Aprenentatge mitjançant resolució de problemes i casos d'estudi, a través dels quals es va adquirint competències sobre els diferents aspectes de les matèries i assignatures.

MD3 - Activitats pràctiques de laboratori. Inclouen preparació, realització de les pràctiques amb el seguiment i suport del professorat, treball autònom en línia i elaboració d'informes de les pràctiques.

MD4 - Competències transversals. Inclouen assistència a cursos, conferències o taules rodones organitzades per la CCA del Màster i / o realització d'un treball bibliogràfic sobre temes que contribueixin a la formació integral. S'elabora una memòria de les activitats.

AVALUACIÓ

A les dues convocatòries:

SE1 Avaluació continuada: 5%.

SE3 Laboratori: 55%.

SE4 Exàmens: 40%.

BIBLIOGRAFIA

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.