

Fecha de aprobación: 21/06/2023

Guía docente de la asignatura

## Estructura de Biomacromoléculas (2511122)

<b>Grado</b>	Grado en Biotecnología	<b>Rama</b>	Ciencias				
<b>Módulo</b>	Biología Fundamental	<b>Materia</b>	Estructura de Biomacromoléculas				
<b>Curso</b>	2º	<b>Semestre</b>	1º	<b>Créditos</b>	6	<b>Tipo</b>	Obligatoria

### PRERREQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES

- Haber superado las asignaturas "Química", "Fundamentos de Informática y Bioinformática" y "Termodinámica y Cinética Química"
- Se recomienda seguir el orden cronológico en el que se ofrecen las enseñanzas de los módulos de formación básica y biología fundamental.
- Tener conocimientos adecuados sobre:
  - Fundamentos y aplicaciones de técnicas espectroscópicas (espectroscopia de UV-Vis, fluorescencia, IR, dicroísmo circular y RMN).
  - Naturaleza y composición de proteínas y otras biomoléculas.
  - Conceptos básicos de termodinámica y cinética química y formulación matemática de modelos para el análisis de datos.

### BREVE DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS (Según memoria de verificación del Grado)

- El paradigma de la relación estructura-función en las biomacromoléculas y sus repercusiones biotecnológicas.
- Fuerzas inter e intramoleculares no covalentes que determinan las estructuras de biopolímeros.
- Plegamiento de proteínas. Estudios termodinámicos y cinéticos.
- Equilibrio conformacional en ácidos nucleicos. "Melting" y "Annealing" del ADN.
- Interacciones intermoleculares en proteínas y ácidos nucleicos. Ensamblaje de complejos y estructuras supramoleculares.
- Técnicas aplicadas a la elucidación de estructuras de macromoléculas. Resonancia Magnética Nuclear y Difracción de Rayos X.
- Biosensores químico-físicos.

### COMPETENCIAS ASOCIADAS A MATERIA/ASIGNATURA



### COMPETENCIAS GENERALES

- CG04 - Conocer los principios básicos de la estructura y funcionalidad de los sistemas biológicos.

### COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

- CE08 - Tener habilidad para procesar eficazmente la información sobre estructuras de proteínas, ácidos nucleicos y complejos supramacromoleculares, incluyendo el conocimiento básico para extraer información estructural de los espectros de RMN y de los diagramas de difracción de rayos X.

### COMPETENCIAS TRANSVERSALES

- CT03 - Capacidad de aplicar los conocimientos en la práctica y de resolver problemas
- CT05 - Razonamiento crítico

## RESULTADOS DE APRENDIZAJE (Objetivos)

- Utilizar eficazmente la información sobre estructuras de proteínas, ácidos nucleicos y complejos supra-macromoleculares determinadas experimentalmente y contenidas en la base de datos Protein Data Bank (RSCB-PDB y [www.PDB](http://www.PDB)). Analizar, extraer información, manipular y editar archivos PDB.
- Saber analizar estructuras de biomoléculas y realizar cálculos sobre la estabilidad de tales estructuras, a partir de sus coordenadas atómicas y las estimaciones de las contribuciones de las fuerzas no covalentes implicadas utilizando software de visualización y cálculo estructural de difusión libre, así como aplicaciones on line de acceso libre para tales fines.
- Ser capaz de proponer modelos de plegamiento de proteínas basados en los datos estructurales, termodinámicos y cinéticos
- Saber aplicar métodos de análisis de datos experimentales de plegamiento, termodinámicos y cinéticos sobre la base de modelos propuestos
- Entender los criterios de diseño racional de moléculas capaces de actuar como controladores (inhibidores, activadores, promotores, etc.) de los procesos bioquímicos de una determinada macromolécula (diana), tales como fármacos, marcadores, etc.
- Extraer información estructural de los espectros de RMN y de los difractogramas de difracción de rayos X.
- Resolver problemas que impliquen cálculos usando los conocimientos actuales sobre las estructuras y propiedades de biopolímeros en disolución y relacionar los resultados con la función biológica.
- Desarrollar la capacidad de diseñar e implementar biosensores químico-físicos para aplicaciones biotecnológicas específicas.

## PROGRAMA DE CONTENIDOS TEÓRICOS Y PRÁCTICOS

### TEÓRICO

- Tema 1. Las bases estructurales de las funciones de las macromoléculas biológicas



- El paradigma de la relación estructura-función de las biomoléculas.
- Breve revisión general de las conformaciones de las proteínas y su clasificación
- De la estructura a la función. Reconocimiento molecular y sitios de unión.
- **Tema 2. Fuerzas no covalentes que determinan la estabilidad de las estructuras de los biopolímeros**
  - La estabilidad de los biopolímeros
  - Introducción a las fuerzas no covalentes
  - Interacciones electrostáticas
  - Interacciones de van der Waals
  - Enlaces de hidrógeno
  - Efecto hidrofóbico
  - Impedimentos estéricos y efectos conformacionales
  - Balance de fuerzas en la estabilidad de biopolímeros y el papel del disolvente
  - Funciones de energía potencial para la simulación molecular
- **Tema 3. Métodos espectroscópicos para la caracterización estructural de biopolímeros y sus interacciones**
  - Introducción a la determinación estructural de biopolímeros
  - Espectroscopia ultravioleta-visible.
  - Espectroscopia de infrarrojo
  - Espectroscopia de dicroísmo circular
  - Espectroscopia de fluorescencia.
  - Espectroscopia de resonancia magnética nuclear.
  - Cristalografía de proteínas y difracción de rayos X.
  - Criomicroscopia electrónica.
- **Tema 4. Equilibrio conformacional y plegamiento**
  - Complejidad del equilibrio conformacional en proteínas y ácidos nucleicos
  - Fundamentos de Termodinámica-Estadística y su aplicación al estudio del equilibrio conformacional de biopolímeros
  - El equilibrio conformacional de proteínas y su medida
  - Calorimetría diferencial de barrido
  - La estabilidad de las proteínas
  - Transiciones multiestado y cooperatividad
  - Equilibrio conformacional en ácidos nucleicos
- **Tema 5. Estudios cinéticos del plegamiento de proteínas**
  - Introducción al problema del plegamiento de las proteínas
  - Mecanismos de plegamiento de proteínas
  - Caracterización del plegamiento de las proteínas
  - Defectos de plegamiento y enfermedades relacionadas
- **Tema 6. Interacciones biomoleculares**
  - Conceptos básicos para la descripción de las interacciones biomoleculares
  - Formulación termodinámica del equilibrio de unión
  - Formulación general de curvas de unión para sistemas complejos: sitios distintos y cooperatividad
  - Alosteroismo
  - Caracterización termodinámica de la interacción macromolécula-ligando.

## PRÁCTICO

### Seminarios/Talleres

- Seminario 1.- Bases de datos para el estudio de biomoléculas (2h, Ordenador) Semana 2: 18-22 septiembre
- Seminario 2.- Proyecto COVID19-Part I (2h, Ordenador) Trabajo personal Semanas 3-4: 25 septiembre-6 octubre



### Prácticas de Laboratorio/ordenador

- Práctica 1. Proyecto COVID19-Parte II: Visualización y análisis de la estructura de proteínas haciendo uso de herramientas informáticas (3h, Ordenador) Semana 5: 9-13 octubre
- Práctica 2. Cristalización de proteínas (3h, Laboratorio) Semana 6: 16-20 octubre
- Práctica 3. Análisis de la calidad de las estructuras tridimensionales de biomoléculas (2h, Ordenador) Semana 9: 6-10 noviembre
- Práctica 4.- Análisis espectroscópico de la desnaturalización química de proteínas (3h, Laboratorio) Semana 10: 13-17 noviembre
- Práctica 5. Formulación, simulación y análisis de curvas de desplegamiento térmico y químico de proteínas de acuerdo al modelo de dos estados (3h, Ordenador) Semana 11: 20-24 noviembre
- Práctica 6. Formulación, simulación y análisis de curvas de desnaturalización térmica mediante Calorimetría Diferencial de Barrido (3h, Ordenador) Semana 12: 20-24 noviembre
- Práctica 7.- Formulación, simulación y análisis de curvas de unión proteína-ligando utilizando modelos termodinámicos (3h, Ordenador) Semana 14: 11-15 diciembre

### BIBLIOGRAFÍA

#### BIBLIOGRAFÍA FUNDAMENTAL

- Estructura de proteínas. Carlos Gómez-Moreno y Javier Sancho (Coords.). Ariel Ciencia. 2003 (Español)
- Principles of Physical Biochemistry. K.E. van Holde; W.C. Johnson and P.S. Ho. Ed. Prentice Hall. 2006 (Inglés)
- The Molecules of Life. Physical and Chemical Principles; J. Kuriyan, B. Konformi, D. Wmmer (2013) (Inglés)
- Protein actions. Principles and modeling; I. Bahar, R.L. Jernigan, K.A. Dill (2017). Ed. Garland Science (Inglés)
- Biomolecular Thermodynamics. From Theory to Application; Douglas E. Barrick. Ed. CRC Press (2018) (Inglés)
- Biophysical Chemistry. Part I, II y III. Cantor y Schimmer. Ed. W. H. Freeman and Company, 1980 (Inglés)
- Bioquímica. Christopher K. Matthews and K. E. Van Holde. Ed. McGraw-Hill Interamericana. 2ª Edición. 2003 (Castellano)
- Physical Chemistry of Macromolecules (Second Edition). S.F. Sun. John Wiley and Sons. Inc 2004 (Inglés)
- Protein Structure, Stability and Folding. Editado por Kenneth P. Murphy. Humana Press 2001 (Inglés)
- Biological Spectroscopy. I.D. Campbell and R. A Dwek. Ed. The Benjamin/Cummings Publishing Company Inc. (Inglés)
- NMR of proteins and nucleic acids. Kurt Wüthrich. John Wiley & Sons 1986 (Inglés)
- Nuclear Magnetic Resonance. P.J. Hore Ed. Oxford Science Publications. 1995 (Inglés)
- Structure Determination by x-Ray Crystallography. Mick Inkpen. J.F.C. Ladd and R.A. Palmer. Ed. Springer, 1994
- An introduction to X-Ray Crystallography. SEcond Edition. M.M. Woolfson. Cambridge University Press. 1997 (Inglés).

#### BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA



- The Physical Basis of Biochemistry. P. R. Bergenthon. Ed. Springer 1998 (Inglés)
- Biophysical Chemistry. A. Cooper. Royal Society of Chemistry 2004 (Inglés)
- Principles of Protein Structure. G.W. Schultz and R. H. Chirmer. Ed. Springer-Verlag. 1979 (Inglés)
- Bioquímica Física. K. E van Holde. Ed. Alhambra. Colección Exedra. 1980. (Castellano)
- Protein- Ligand Interactions. A practical approach. Stephen E. Harding. Oxford University Press. 2000 (inglés)
- DNA-Protein Interactions. Andrew Arthur Travers. Chapman & Hall 1993 (Inglés).
- Understanding DNA. R. C. Calladine, Horace R. Drew, Ben F. Luisi, Andrew A. Travers. Elsevier 2004 (Inglés)
- Biological Thermodynamics. Donald T. Haynie. Cambridge University Press 2001 (Inglés)
- Statistical Thermodynamics. Fundamentals and Applications. Laurendeau N. M. Cambridge University Press 2005.

## ENLACES RECOMENDADOS

- Plataforma de Apoyo a la Docencia PRADO2
- Base de datos PDB (<https://www.rcsb.org/>)
- Base de datos UniProt (<https://www.uniprot.org/>)
- Base de datos PFAM (<http://pfam.xfam.org/>)
- Swiss Institute of Bioinformatics EXPASY (<https://www.expasy.org/>)
- Gene Ontology Resource (<http://geneontology.org>)

## METODOLOGÍA DOCENTE

- MD01 - Clases de teoría
- MD02 - Clases de prácticas: Prácticas usando aplicaciones informáticas
- MD03 - Clases de prácticas: Prácticas en laboratorio
- MD04 - Clases de prácticas. Clases de problemas
- MD06 - Trabajo autónomo del alumnado
- MD07 - Tutorías

## EVALUACIÓN (instrumentos de evaluación, criterios de evaluación y porcentaje sobre la calificación final)

### EVALUACIÓN ORDINARIA

Las actividades de evaluación incluirán:

- **Examen final (55%)**. Realización de un examen escrito sobre todos los contenidos de la asignatura, tanto teóricos como prácticos. El examen incluirá preguntas teóricas, problemas y desarrollo de casos prácticos.
- **Informes de prácticas (20%)**. Elaboración y presentación de informes que recojan los aspectos prácticos y el análisis de datos realizado en las sesiones prácticas. Se valorará la adquisición de habilidades prácticas y la presentación del cuaderno de laboratorio. **La asistencia a las prácticas es obligatoria**. La no asistencia a cualquiera de las sesiones de prácticas supondrá un cero en el 20 % de la calificación global, en el caso de que no sea debidamente justificada.
- **Trabajos individuales y en grupo (15%)**. Elaboración y defensa oral de un proyecto





transversal en el que se apliquen los conocimientos de la asignatura a un problema biotecnológico de interés y que se irá realizando a lo largo del cuatrimestre.

- **Participación en clase y resolución de ejercicios (10%).** Se incluyen en este apartado tareas de índole diversa, destinadas al seguimiento continuado de la asignatura y a completar la evaluación continua: entregas obligatorias de ejercicios resueltos antes de las pruebas parciales, tareas wiki de Prado, exposiciones de trabajos o problemas sencillos que podrían plantearse de improvisación durante una clase presencial. Se valorarán en este apartado asimismo los cuestionarios que se irán realizando online para cada uno de los temas a partir de preguntas elaboradas por los propios alumnos. Se valorará la calidad de las preguntas planteadas por el alumno así como el número de preguntas contestadas correctamente en los cuestionarios.

Para aprobar la asignatura será necesario cumplir dos condiciones:

- la nota obtenida en el examen escrito final debe ser superior a 5 puntos sobre 10.
- la media de las notas obtenidas en las demás actividades de evaluación debe ser superior a 5 puntos sobre 10.

Si se superan estos umbrales, la calificación final de la asignatura será una media ponderada de las notas obtenidas en el examen final (55%), prácticas (20%), proyecto y trabajos (15%) y actividades de clase (10%).

En caso de que no se superen algunos de los umbrales establecidos la asignatura estará suspensa y la calificación final será la nota media ponderada de las distintas actividades hasta un máximo de 4 puntos sobre 10.

### EVALUACIÓN EXTRAORDINARIA

La evaluación en la convocatoria extraordinaria consistirá en dos pruebas escritas:

- Un examen escrito sobre los contenidos del temario general de la asignatura que incluirá preguntas teóricas, problemas y resolución de casos prácticos (75%).
- Una prueba escrita específica sobre el temario práctico que incluirá cuestiones sobre las prácticas de laboratorio y ordenador, seminarios y proyecto transversal (25%). En el caso de tener aprobadas estas actividades con una calificación promedio mayor de 5/10 en la convocatoria ordinaria, el alumno tendrá la opción de mantener su nota y no realizar la segunda parte del examen.

Para aprobar la asignatura será necesario obtener una calificación mayor que 5 en las dos partes del examen (examen teórico y examen de prácticas).

Si se superan estos umbrales, la calificación final de la asignatura será una media ponderada de las notas obtenidas en las dos partes del examen final: teoría (75%) y prácticas (25%).

En caso de que no se superen algunos de los umbrales establecidos la asignatura estará suspensa y la calificación final será la nota media ponderada de las distintas actividades hasta un máximo de 4 puntos sobre 10.

### EVALUACIÓN ÚNICA FINAL

La evaluación única final se llevará a cabo en un único acto académico el día de la convocatoria oficial de examen para la asignatura e incluirá preguntas tanto del temario teórico (75% de la nota) como práctico (25% de la nota), que garanticen que el alumno ha adquirido la totalidad de las competencias descritas en la presente guía docente. En el caso de la parte práctica, estas preguntas podrán incluir la realización de supuestos prácticos manejando el software y las bases de datos utilizados a lo largo del curso en las sesiones prácticas y seminarios.

Para aprobar la asignatura será necesario obtener una calificación mayor que 5 en las dos partes del examen (examen teórico y examen de prácticas).

Si se superan estos umbrales, la calificación final de la asignatura será una media ponderada de las notas obtenidas en las dos partes del examen final: teoría (75%) y prácticas (25%).

En caso de que no se superen algunos de los umbrales establecidos la asignatura estará



**suspensa y la calificación final será la nota media ponderada de las distintas actividades hasta un máximo de 4 puntos sobre 10.**

Para acogerse a la evaluación única final, el estudiante, en las dos primeras semanas de impartición de la asignatura, lo solicitará al Director del Departamento alegando y acreditando las razones que le asisten para no poder seguir el sistema de evaluación continua. La dirección del Departamento dará traslado al profesorado correspondiente. Transcurridos diez días sin que el estudiante haya recibido respuesta expresa y por escrito del Director del Departamento se entenderá que ésta ha sido desestimada. En caso de denegación, el estudiante podrá interponer, en el plazo de un mes, recurso de alzada ante el Rector, quién podrá delegar en el Decano o Director del Centro, agotando la vía administrativa.

El sistema de calificaciones se expresará mediante calificación numérica de acuerdo con lo establecido en el art. 5 del R. D 1125/2003, de 5 de septiembre, por el que se establece el sistema europeo de créditos y el sistema de calificaciones en las titulaciones universitarias de carácter oficial y validez en el territorio nacional.

