

**FITXA IDENTIFICATIVA****Dades de l'Assignatura**

Codi	42588
Nom	Bioinformàtica estructural
Cicle	Màster
Crèdits ECTS	3.0
Curs acadèmic	2023 - 2024

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
2116 - M.U. en Bioinformàtica 12-V.1	Escola Tècnica Superior d'Enginyeria	1	Segon quadrimestre

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
2116 - M.U. en Bioinformàtica 12-V.1	6 - Bioinformàtica estructural	Obligatòria

Coordinació

Nom	Departament
ARNAU LLOMBART, VICENTE	240 - Informàtica

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.

CONEIXEMENTS PREVIS**Relació amb altres assignatures de la mateixa titulació**

No heu especificat les restriccions de matrícula amb altres assignatures del pla d'estudis.



Altres tipus de requisits

No hi ha

COMPETÈNCIES

2116 - M.U. en Bioinformàtica 12-V.1

- 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 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.
- 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 posseïsquen les habilitats d'aprenentatge que els permeten continuar estudiant d'una forma que haurà de ser en gran manera autodirigida o autònoma.
- 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.
- 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.
- Ser capaços d'accedir a ferramentes d'informació en altres àrees del coneixement i utilitzar-les apropiadament.
- Ser capaços de valorar la necessitat de completar la seva 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 seva formació integral.
- Desenvolupar la iniciativa personal i ser capaces de realitzar una presa ràpida i eficaç de decisions en la seua labor professional i/o investigadora.
- Treballar en equip amb eficiència en la seua labor professional y/o investigadora i amb persones de diferent procedència.

RESULTATS DE L'APRENTATGE

Dominar els conceptes bàsics de la biologia estructural i la biofísica i les eines bioinformàtiques essencials de maneig d'estructures d'àcids nucleics i proteïnes.



Conèixer l'ús i desenvolupament de mètodes principals de predicció d'estructura tridimensional d'àcids nucleics i proteïnes.

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**

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Classes de teoria	10,50	100
Pràctiques en laboratori	4,50	100
Elaboració de treballs en grup	5,00	0
Elaboració de treballs individuals	10,00	0
Estudi i treball autònom	15,00	0
Lectures de material complementari	10,00	0
Preparació d'activitats d'avaluació	10,00	0
Preparació de classes de teoria	5,00	0
Preparació de classes pràctiques i de problemes	5,00	0
TOTAL	75,00	

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 professor, 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

En les dues convocatòries

SE1 Avaluació contínua: mínim 5 i màxim 15.

SE2 Activitats: mínim 10 i màxim 50.

SE3 Laboratori: mínim 25 i màxim 75.

SE4 Exàmens: mínim 0 i màxim 40.



REFERÈNCIES

Bàsiques

- Referència b1: Structural Bioinformatics. Jenny Gu, Philip E. Bourne. Ed. John Wiley & Sons, 2009.
- Belton JM, McCord RP, Gibcus JH, Naumova N, Zhan Y, Dekker J. 2012. Hi-C: a comprehensive technique to capture the conformation of genomes. *Methods* 58: 268-276.
- Cavalli G, Misteli T. 2013. Functional implications of genome topology. *Nature structural & molecular biology* 20: 290-299.
- Dekker J, Marti-Renom MA, Mirny LA. 2013. Exploring the three-dimensional organization of genomes: interpreting chromatin interaction data. *Nature reviews Genetics* 14: 390-403.

Complementàries

- Referència c1: Structural Bioinformatics: An Algorithmic Approach (Chapman & Hall/CRC Mathematical & Computational Biology). Forbes J. Burkowski. 2008 | ISBN-10: 1584886838.
- Referència c2: Structural Bioinformatics. Ed. Aaron Philippe Toll. 2012. ISBN-10: 6200704244 | ISBN-13: 978-6200704245