# INGENIERÍA DE PROTEÍNAS Y DISEÑO MOLECULAR (2017-18)

## DATOS GENERALES

Código 36660

Créditos ECTS 2

### Departamentos y áreas

| Departamento | Área | Dpt. Resp. | Dpt. Acta |
|---|---|---|---|
| AGROQUIMICA Y BIOQUIMICA | BIOQUIMICA Y BIOLOGIA MOLECULAR | SÍ | SÍ |

### Estudios en que se imparte

MÁSTER UNIVERSITARIO EN QUÍMICA MÉDICA

MÁSTER UNIVERSITARIO EN BIOTECNOLOGÍA PARA LA SALUD Y LA SOSTENIBILIDAD

MÁSTER UNIVERSITARIO EN BIOMEDICINA

### Contexto de la asignatura

Las propiedades funcionales de las proteínas dependen en su mayor parte de su estructura tridimensional, la cual viene dada por su secuencia de aminoácidos que se pliegan en dominios específicos, en dicho proceso influye en gran medida las condiciones del medio donde se produce el plegado. Con el animo de comprender y poder modular de una forma racional la función de las proteínas, se definen métodos y algoritmos que nos permitan desde el propio plegamiento hasta cambios en los dominios de estructuras de proteína e interacciones entre más de una molécula. Todo ello nos lleva a un conocimiento más dinámico, con resultados más dirigidos con el consiguiente ahorro de tiempo. Por ejemplo: en el desarrollo de fármacos, o en el estudio de regulación e interacción entre dos moléculas. Día a día se hace posible el uso de métodos de cálculo más potentes no sólo de Mecánica Molecular sino también de Mecánica Cuántica tanto semiempíricos como ab initio gracias al progreso en hardware que ocurre dentro de esta revolución Científico-Tecnológica. Por todo ello la materia de Ingeniería de Proteínas y Diseño Molecular va ganando preponderancia en el momento actual en un contexto de estudio de Biotecnología como es el Master donde se imparte.

# OBJETIVOS

## Objetivos específicos aportados por el profesorado (2017-18)

Resultados del aprendizaje que el estudiante adquiere :

1. Adquisición de las habilidades necesarias para la utilización del software específico para el cálculo de estructuras.

Competencias

CEBT25, CEBT26

2. Conocer los fundamentos metodológicos y saber interpretar los resultados obtenidos en los diferentes métodos de optimización de geometría y dinámica de proteínas.

Competencias

CEBT25, CEBT26

3. Aprender los fundamentos para un diseño racional de mutantes a partir del análisis de la estructura de la proteína.

Competencias

CEBT1, CEBT10, CEBT25 y CEBT26

4. Fomentar el trabajo en equipo, el espíritu crítico en el análisis de resultados y la capacidad de discusión y exposición de los mismos.

Competencias:

CB1-3, CB5, CB6-10, CB15-16 CG2-4, CGUA1-3

# CONTENIDOS

## Contenidos teóricos y prácticos (2017-18)

Introducción modelado molecular. Generación de coordenadas tridimensionales. Datos de cristales. Herramientas computacionales para la optimización de geometría. Campos de Fuerza. Métodos semiempiricos. Cálculos "Ab initio". Análisis conformacional. Dinámica Molecular. Potencial electrostático molecular. Análisis de superficies moleculares. Análisis de complejos ligando proteína. Descripción del diseño de fármacos. Ejemplos: Generación de mutantes. Mutagénesis dirigida.

# EVALUACIÓN

## Instrumentos y criterios de Evaluación 2017-18

Evaluación continua (seguimiento del trabajo personal del alumno, del trabajo de laboratorio u otros medios explicitados en la programación de la asignatura). La evaluación incluirá un ejercicio que se le propondrá a cada alumno para resolver en la segunda parte del semestre, la valoración de este ejercicio no superará el 50% de la nota final.

| Tipo | Criterio | Descripción | Ponderación |
|---|---|---|---|
| ACTIVIDADES DE EVALUACIÓN DURANTE EL SEMESTRE | Los alumnos realizarán un ejercicio a propuesta del profesor donde para su realización se necesitara poner en práctica todos los conocimientos adquiridos. Y se puntuaran especialmente las conclusiones que el alumno extraiga de los datos que obtenga. | Ejercicio de Evaluación | 50 |
| ACTIVIDADES DE EVALUACIÓN DURANTE EL SEMESTRE | Seguimiento del trabajo personal del alumno, del trabajo de laboratorio u otros medios explicitados en la programación de la asignatura | Seguimiento del trabajo personal | 50 |