Universidad de Navarra

Análisis de secuencias y bioinformática estructural (MCD)

Guía docente 2025-26

PRESENTACIÓN

La función de una proteína está determinada por su estructura tridimensional y ésta, a su vez, viene definida por su secuencia de aminoácidos. Esta interrelación explica la necesidad de conocer mejor los determinantes que contribuyen a la información estructural codificada en las proteínas lo que nos ayudará a entender mejor el funcionamiento de las mismas. Este curso proporcionará una visión general de técnicas bioinformáticas dirigidas a predecir, simular, validar y analizar estructuras de proteínas y complejos proteína/ligando de interés biológico y/o farmacológico. De forma complementaria, aportará una visión práctica sobre cómo y cuándo deben emplearse estas técnicas.

• **Titulación:** MÁSTER UNIVERSITARIO EN CIENCIA DE DATOS PARA CIENCIAS EXPERIMENTALES

• **Módulo y materia:** Módulo III Optativo. Materia 3.1. Optativas

• **Carácter:** Optativa

• **ECTS:** 3

• **Curso y semestre:** Curso 1º y semestre 2º

• **Idioma:** Español

• **Profesor responsable de la asignatura**: Antonio Ángel Pineda Lucena

• **Horario y aula:** consultar calendario del máster

RESULTADOS DE APRENDIZAJE (Competencias)

Emplear las principales técnicas bioinformáticas dirigidas a predecir, simular, validar y analizar estructuras de proteínas y complejos proteína/ligando de interés biológico y/o farmacológico.

PROGRAMA

1.- Introducción a la bioinformática estructural: Motivaciones, objetivos y retos

2.- Representación de secuencias de proteínas en el ordenador

3.- Comparación de secuencias binarias y múltiples

4.- Bases de datos de utilidad en bioinformática estructural

5.- Manipulación, visualización y comparación de estructuras

6.- Predicción de características estructurales 1D

7.- Predicción de estructuras tridimensionales

Universidad de Navarra

8.- Evaluación de la calidad de las estructuras

9.- Características biofísicas, bioquímicas y funcionales derivadas de la estructura

10.- Modelado de interacciones entre proteínas y ligandos

11.- Redes de interacciones de proteínas

12.- Redes metabólicas

ACTIVIDADES FORMATIVAS

Asignatura de 3 ECTS

Actividades presenciales: 25h

Actividades no presenciales: 50h (15h de trabajos dirigidos y 35h de estudio personal)

EVALUACIÓN

Presencialidad activa: 10%

Resolución de casos prácticos: 15%

Trabajos individuales: 30%

Examen, prueba escrita: 45%

HORARIOS DE ATENCIÓN

La atención al estudiantado se realizará únicamente con cita previa, solicitándola a través del correo electrónico: apinedal@unav.es

BIBLIOGRAFÍA Y RECURSOS

Pazos, F., & Chagoyen, M. (2015). ***Practical Protein Bioinformatics*** (1st ed. 2015.). Springer International Publishing. https://doi.org/10.1007/978-3-319-12727-9 Localízalo en la biblioteca [recurso electrónico]

Koča, J., Svobodová Vařeková, R., Pravda, L., Berka, K., Geidl, S., Sehnal, D., & Otyepka, M. (2016). ***Structural Bioinformatics Tools for Drug Design : Extraction of Biologically Relevant Information from Structural Databases*** (1st ed. 2016.). Springer International Publishing. https://doi.org/10.1007/978-3-319-47388-8 Localízalo en la biblioteca [recurso electrónico]

Shanker, Asheesh. (Ed.). (2018). ***Bioinformatics: Sequences, Structures, Phylogeny*** (1st ed. 2018.). Springer Singapore. https://doi.org/10.1007/978-981-13-1562-6 Localízalo en la Biblioteca [recurso electrónico]

Universidad de Navarra

Mohan, C. Gopi. (Ed.). (2019). ***Structural Bioinformatics: Applications in Preclinical Drug Discovery Process*** (1st ed. 2019.). Springer International Publishing. https://doi.org/10.1007/978-3-030-05282-9 Localízalo en la Biblioteca [recurso electrónico]