



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 \[Recurso electrónico\]](#)