



## ANÁLISIS DE SECUENCIAS Y BIOINFORMÁTICA ESTRUCTURAL

### 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
- **Profesores:** Antonio Ángel Pineda Lucena
- **Horario y aula:** consultar calendario del máster

### RESULTADOS DE APRENDIZAJE

RAO6 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
- 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



Universidad  
de Navarra

Facultad de Ciencias

### **ACTIVIDADES FORMATIVAS**

Asignatura de 3 ECTS.

ACTIVIDADES PRESENCIALES 25 horas

- Clases presenciales teóricas (25 horas)

ACTIVIDADES NO PRESENCIALES 50 horas

- Trabajos dirigidos (15 horas)

- Estudio personal (35 horas)

### **SISTEMAS DE EVALUACIÓN**

Presencialidad activa: 10%

Resolución de casos prácticos: 15%

Trabajos individuales: 30%

Examen, prueba escrita: 45%

### **BIBLIOGRAFÍA**

Pazos et al., "Practical Protein Bioinformatics", Springer, 2015 Localízalo en la Biblioteca [recurso electrónico]

Koca et al., "Structural Bioinformatics Tools for Drug Design: Extraction of Biologically relevant information from structural databases", Springer, 2016 Localízalo en la Biblioteca [recurso electrónico]

Shanker, "Bioinformatics: Sequences, Structures, Phylogeny", Springer, 2018 Localízalo en la Biblioteca [recurso electrónico]

Mohan, "Structural Bioinformatics: Applications in preclinical drug discovery process", Springer, 2019 Localízalo en la Biblioteca [recurso electrónico]