



DADES GENERALS

Nom de l'assignatura : Disseny Molecular de la vida: de l'Estructura a la funció

Codi:

Tipus : Optativa

Impartició: Primer semestre

Departaments implicats : Ciències Fisiològiques II

Nom del professor coordinador : Gabriel Pons Irazazábal

Membres de l'equip docent: Gabriel Pons Irazazábal

Crèdits ECTS : 3

Hores estimades de l'assignatura :

- Hores presencials 30h
- Hores aprenentatge autònom 45h

Prerequisits per cursar l'assignatura

Tenir superades les assignatures Bioquímica , Biologia Molecular de la Cèl·lula, Genètica, Biologia Cel·lular, Biologia del desenvolupament, Patologia Molecular general i patologia Molecular d'òrgans i sistemes

Competències que es desenvolupen en l'assignatura

Competències generals

Com100006

Capacidad comunicativa (capacidad de comprender y de expresarse oralmente y por escrito en catalán, castellano y en una tercera lengua, dominando el lenguaje especializado/capacidad de buscar, usar y integrar la información)petències que es desenvolupen en l'assignatura

121016 4. Desarrollo de habilidades técnicas. Habilidad para utilizar el ordenador con los programas informáticos más habituales. Capacidad de ordenación y estructuración del tiempo de trabajo.

Competències específiques de la titulació

121141 El alumnado tiene que adquirir habilidades informáticas con el fin de garantizar una actualización profesional permanente.

121146 El alumnado tiene que conocer los conceptos y el lenguaje bioquímicos, aprender a utilizar el enfoque bioquímico en el estudio de las funciones celulares y del organismo. Es necesario que sepa utilizar las técnicas básicas de un laboratorio bioquímico.

121175 El alumnado tiene que saber identificar las principales patologías y sus causas: genéticas, metabólicas, tóxicas, infecciosas, autoinmunitarias, neoplásicas, degenerativas, traumáticas, ambientales, sociales, ocupacionales y del envejecimiento.

Objectius d'aprenentatge de l'assignatura

OBJECTIUS GENERALS

Aquesta assignatura té dos objectius primordials:

1. Aprofundir en la incorporació del nivell molecular en la formació dels estudiants de grau , complementant així els coneixements i les habilitats adquirides en les assignatures de Bioquímica, Biologia molecular i de la cèl.lula i les Patologies Moleculares . Aquest abordatge serà fonamentalment de tipus **estructura-funció**, i s'insistirà en els aspectes estructurals que ens permeten comprendre la funció i, en molts casos, les conseqüències patològiques de les anomalies estructurals. No es pretén donar una visió exhaustiva o completa de totes les macromolècules. S'utilitzaran alguns models per estudiar-los en certa profunditat.
2. Saber emprar les eines informàtiques disponibles actualment per obtenir informació acurada, veraç i contrastada. Es faran servir programes de visualització molecular i l'ús de connexions a Internet per accedir a les bases de dades bioinformàtiques . en aquest sentit un objectiu important de l'assignatura es subministrar a l'alumne una formació bàsica en bioinformàtica aplicada a la biologia molecular

OBJECTIUS ESPECÍFICS:

Com a resultat del procés d'aprenentatge, l'alumnat ha de ser capaç de dur a terme els objectius específics següents, propis de l'àrea de bioquímica i biologia molecular:

1. Explicar els conceptes principals sobre evolució biològica i bioquímica.
2. Explicar els principis generals del "disseny" i funcionament de les proteïnes.
 - 2.1. Capacitat d'unió específica
 - 2.2. Capacitat catalítica
 - 2.3. canvis de conformació
 - 2.4. Formació e fibres
3. Descriure els principis d'estructura, la funció i les patologies derivades dels tipus de macromolècules següents:
 - 3.1. Proteïnes de membrana; canals d'aigua i d'ions.
 - 3.2. Proteïnes amb activitat catalítica
 - 3.2.1. Estratègies de catàlisi
 - 3.2.2. Principis de regulació de la catàlisi
 - 3.3. Proteïnes de defensa: els anticossos. Anticossos catalítics.
 - 3.4. Proteïnes receptores i amb capacitat de reconèixer el ADN de forma específica: receptors d'estrògens i càncer de mama.
4. Accedir via Internet a les bases de dades que contenen la informació corresponent a les estructures tridimensionals de les macromolècules i a altres bases de dades sobre literatura mèdica, genomes, gens i proteïnes.
5. Entendre i interpretar el contingut dels arxius PDB que contenen les dades estructurals de les macromolècules.
6. Instal·lar i utilitzar el programa Jmol per a la visualització molecular a nivell principiant-mig.

1. **Disseny molecular com falàcia: La lògica molecular de la vida. Principis bàsics del no disseny de les macromolècules biològiques**
 - 1.1. Lògica molecular de la vida
 - 1.2. Evolució molecular de la vida
 - 1.3. Principis genèrics del "disseny" químic de les macromolècules biològiques
2. **Bioinformàtica de seqüències.**
 - 2.1. Bases de dades: GenBank, EBI, Uniprot
 - 2.2. Comparació de seqüències. Homòlegs. Blast.
 - 2.3. Alineaments múltiples
3. **Bioinformàtica estructural i visualització molecular**
 - 3.1. Jmol .Visualitzacions bàsiques
 - 3.2. Jmol. Opcions mitges/avançades
 - 3.3. First Glance Jmol
 - 3.4. Pymol
 - 3.5. Arxius PDB
 - 3.6. Proteopedia
 - 3.7. Comparació d'estructures. Superpose
4. **"Disseny" de proteïnes de membrana**
 - 4.1. Característiques generals de les proteïnes de membrana
 - 4.2. Estratègies de transport a través de la membrana
 - 4.3. Les aquaporines
 - 4.3.1. Principis d'estructura-funció
 - 4.3.2. Disseny selectiu del por
 - 4.3.3. Estructures moleculars patològiques: la diabetis insípida
 - 4.3.4. Canals i bombes iòniques
 - 4.3.4.1. Principis d'estructura-funció
 - 4.3.4.2. Disseny selectiu del por
 - 4.3.4.3. Estructures moleculars patològiques

5. “Disseny” de proteïnes de transport en solució: les globines

- 5.1. El domini de les globines i el grup hemo com paradigma de grup prostètic
- 5.2. Mioglobina versus hemoglobines
- 5.3. Evolució de les mioglobines en mamífers aquàtics
- 5.4. Patologies moleculars de les globines. Anemia falciforme

6. Reconeixement molecular: Proteïnes de defensa. Els anticossos

- 6.1. “Disseny” molecular dels anticossos
- 6.2. Estructura- funció dels anticossos
- 6.3. Anticossos catalítics
- 6.4. Patologies associades als anticossos

7. Proteïnes amb activitat catalítica

- 7.1. “Disseny” estructural dels enzims: exemple de les proteases seríniques; mecanisme
- 7.2. Fosfofructoquinases com paradigma d'enzims reguladors
- 7.3. Caspases i inhibidors de caspases
- 7.4. Enzims i càncer: Piruvat quinasa 2; Isocitrat deshidrogenasa mutant i gliomes
- 7.5. Aminoacil tRNA ligases

8. Proteïnes receptores i amb capacitat de reconèixer l'ADN: receptors d'estrògens i càncer de mama

- 8.1. “Disseny” dels receptors d'hormones sexuals
- 8.2. Principis de la transducció del senyal
- 8.3. Alteracions moleculars del càncer de mama relacionades amb el sistema
- 8.4. Arsenal farmacològic del càncer de mama
- 8.5. Bases moleculars de l'arsenal farmacològic
- 8.6. Resistències a les drogues del càncer de mama

Metodologia i organització general de l'assignatura

Tot l'ensenyament es desenvoluparà en forma de sessions d'ordinador, a fi de treballar els objectius teórico-pràctics continguts en el temari.

Programes informàtics amb els quals es treballarà:

- Visualització molecular: programa **Jmol** i altres programes de visualització molecular
- Programes i webs bioinformàtiques per analitzar i comparar seqüències i estructures de proteïnes

- Programes d'edició d'imatges, a nivell elemental

Avaluació

- a) Assistència, actitud i participació a les classes; avaluació del treball desenvolupat a les classes i a les sessions d'ordinador
- b) Prova de control. Aquest treball es farà de manera individual i una part o la totalitat es desenvoluparà durant les classes presencials.
- c) Treball final individual

- **Criteris d'avaluació**

S'avaluaran:

- La obtenció acurada de la informació biomèdica
- L'ús correcte de les eines informàtiques utilitzades durant el curs
- La comprensió dels principis estructura-funció de les macromolècules.
- La capacitat d'utilitzar els coneixements apresos en la visualització molecular per ordinador per generar imatges i presentacions.
- La capacitat d'aplicar els coneixements de estructura-funció a la resolució de problemes experimentals
- L'aprenentatge en l'ús dels programes de visualització molecular.

- **Criteris de qualificació final (prova de síntesi)**

No hi haurà prova de síntesi ja que l'assignatura s'avalua a partir dels treballs realitzats per l'alumne al llarg del semestre

- **Sistema de puntuació i ponderació**

Actitud i participació a classe i en l'assignatura en general: debats, participació al forum, intervencions a classe: 25%. Aquest percentatge s'ha d'interpretar com puntuació que ha d'anar sumant l'alumne. De forma que al començar l'assignatura l'alumne té 0 punts d'aquest apartat i podrà anar sumant en la mesura que tingui actitud positiva i participativa. Fins arribar a un màxim de 2.5 punts

Treball de mig semestre (prova de control) :

25% de la puntuació final:

Treball final:

50% de la puntuació final.

Al Campus es publicarà informació detallada sobre els continguts del treball final. I el professor oferirà explicacions a les classes sobre el treball final. Aquest treball versarà sobre un proteïna, que pot escollir l'alumne, fent un treball que relacioni l'estructura, la funció i les possibles patologies implicades

Fons d'informació bàsica

BIBLIOGRAFIA

BRANDEN, C. et al. Introduction to protein structure. 2a ed. Garland, 1999.

PETSKO, G. A.; RINGE, D. Protein structure and function. New Science Press, 2003.

STRYER, L. Bioquímica. 6a ed. Reverté, 2008.

NELSON, D.; COX, M. Lehninger, Principios de bioquímica. 4a ed. Editorial Omega, 2005.

LODISH, H. et al. Molecular cell biology. 5a ed. Freeman, 2004.