



Asignatura: Fronteras en el estudio de las biomoléculas  
Código: 32846  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Master Universitario en Biomoléculas y Dinámica Celular  
Nivel: Máster  
Tipo: Obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

## ASIGNATURA / COURSE TITLE

FRONTERAS EN EL ESTUDIO DE LAS BIOMOLÉCULAS / **UNDERSTANDING BIOMOLECULES**

### 1.1. Código / Course number

32846

### 1.2. Materia / Content area

Biología molecular y celular / **Molecular and cell biology.**

### 1.3. Tipo / Course type

Formación obligatoria / **Compulsory subject**

### 1.4. Nivel / Course level

Máster / **Master**

### 1.5. Curso / Year

1º / **1<sup>st</sup>**

### 1.6. Semestre / Semester

1º / **1<sup>st</sup>**

### 1.7. Número de créditos / Credit allotment

6 ECTS / **6 ECTS**

### 1.8. Requisitos previos / Prerequisites

Además de los requisitos generales para el Máster, se requiere un conocimiento previo en aspectos relacionados con estructura y función de proteínas, ácidos nucleicos y complejos biomoleculares. Es necesario tener un buen nivel de inglés (al menos B2 o equivalente).



Asignatura: Fronteras en el estudio de las biomoléculas  
Código: 32846  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Master Universitario en Biomoléculas y Dinámica Celular  
Nivel: Máster  
Tipo: Obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

In addition of the general prerequisites to enroll in the Master, a previous, knowledge on aspects related to structure and function of proteins, nucleic acids and biomolecular complexes is required. A good level of English (equivalent to B2 at least) is also required.

### 1.9. Requisitos mínimos de asistencia a las sesiones presenciales / **Minimum attendance requirement**

La asistencia a todas las clases teóricas, prácticas y visitas interactivas es obligatoria / **Attendance to all classroom activities and interactive visits is mandatory.**

### 1.10. Datos del equipo docente / **Faculty data**

#### **Mauricio García Mateu**

Departamento: Bioquímica y Biología Molecular

Facultad: Ciencias

Universidad Autónoma de Madrid

Centro de Biología Molecular "Severo Ochoa"

Teléfono: 91 1964575

E-mail: [mgarcia@cbm.csic.es](mailto:mgarcia@cbm.csic.es)

URL: <http://web4.cbm.uam.es/joomla-rl/index.php/en/scientific-departments/virology-and-microbiology?id=%20722>

#### **José María Carazo**

Departamento: Estructura de Macromoléculas

Facultad: Centro Nacional d Biotecnología CNB-CSIC

Universidad Autónoma de Madrid

Teléfono: 91 5854543

Email: [carazo@cnb.csic.es](mailto:carazo@cnb.csic.es)

URL: <http://biocomp.cnb.csic.es/carazo>

#### **Mark van Raaij**

Departamento: Estructura de Macromoléculas

Centro Nacional d Biotecnología CNB-CSIC

Teléfono: 91 585 4616

Email: [mjvanraaij@cnb.csic.es](mailto:mjvanraaij@cnb.csic.es)

URL: <http://www.cnb.csic.es/~mjvanraaij>

Horario de atención al alumnado: Por favor contactar previamente por E-mail. Los profesores e investigadores tienen que dedicar sus horas de trabajo



Asignatura: Fronteras en el estudio de las biomoléculas  
Código: 32846  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Master Universitario en Biomoléculas y Dinámica Celular  
Nivel: Máster  
Tipo: Obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

también a actividades en el laboratorio que no siempre pueden ser planificadas con antelación, y pueden no estar disponibles en ciertos días/horas.

Office hours: please make an appointment by E-mail. University professors and researchers have to devote their work hours also to research activities in the laboratory that cannot be always planned in advance, and may not be available at certain dates/hours.

### 1.11. Objetivos del curso / Course objectives

El objetivo principal del curso se expresa en la siguiente competencia específica fundamental (CE03 en la memoria de Verificación del Máster):

El alumno conocerá las técnicas más importantes de la Biología Estructural, comprenderá los principios que determinan la estructura de las macromoléculas biológicas (en particular proteínas y ácidos nucleicos) y los complejos biomoleculares, y será capaz de explicar las relaciones entre su estructura y función biológica.

Para la adquisición de esta competencia fundamental de la asignatura, se identifican las siguientes competencias específicas particulares:

- i) El alumno conocerá las técnicas y estrategias utilizadas para determinar la estructura de proteínas, ácidos nucleicos y sus complejos.
- ii) El alumno conocerá los elementos estructurales que componen las proteínas, los ácidos nucleicos y sus complejos.
- iii) El alumno comprenderá la relación entre la estructura físico-química de proteínas, ácidos nucleicos y sus complejos, y su función biológica.
- iv) El alumno será capaz de resolver cuestiones y problemas técnicos y científicos relacionados con la metodología más importante en Biología Estructural o con la estructura de proteínas, ácidos nucleicos y sus complejos y su relación con el funcionamiento biológico.
- v) El alumno adquirirá la capacidad para plantear y resolver cuestiones y problemas y de interpretar críticamente resultados y conclusiones en el ámbito de la Biología Estructural, utilizando el Método Científico.

La asignatura asume además la parte de cada competencia general, básica y transversal asignadas al Máster en Biomoléculas y Dinámica Celular y a esta asignatura (CG1-6, CB6-10, CT1, CT3, CT5, CT6, CT8, CT9, CT10).

The main goal of this course is expressed in the following basic specific competence (CE03 in the Master Verification Document):



Asignatura: Fronteras en el estudio de las biomoléculas  
Código: 32846  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Master Universitario en Biomoléculas y Dinámica Celular  
Nivel: Máster  
Tipo: Obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

The student will acquire an updated knowledge on the most important techniques used in Structural Biology; the student will understand the principles that determine the structure of biological macromolecules (proteins and nucleic acids in particular) and supramolecular biological complexes; the student will understand the relationships between molecular structure and biological function.

For the acquisition of this fundamental competence, several more specific competences may be stated:

- i) The student will learn the techniques and approaches used to determine the structure of proteins, nucleic acids and their complexes.
- ii) the student will know the structural elements of proteins, nucleic acids and their complexes.
- iii) the student will understand the relationship between the physico-chemical structure of proteins, nucleic acids and their complexes, and their biological function.
- iv) the student will be able to solve technical and scientific questions and problems related with the most important methods used in Structural Biology or with the structure of proteins, nucleic acids and biomolecular complexes, and its relationship with biological function.
- v) The student will acquire the ability to present and solve questions and problems, and to critically interpret results and conclusions in Structural Biology, using the Scientific Method.

This course assumes in addition the corresponding part of each general, basic and transversal competence assigned to the Master in Biomolecules and Cell Dynamics and to this course (CG1-6, CB6-10, CT1, CT3, CT5, CT6, CT8, CT9, CT10).

## 1.12. Contenidos del programa / Course contents

### PROGRAMA

Consta de 32 sesiones presenciales, cada una de 90 minutos.

1. BIOLOGÍA ESTRUCTURAL- INTRODUCCIÓN.

2-3. PRINCIPIOS GENERALES DE LA ESTRUCTURA Y FUNCIÓN DE PROTEÍNAS, ÁCIDOS NUCLEICOS Y COMPLEJOS BIOMOLECULARES.

4-5. CRISTALOGRAFÍA DE RAYOS X.



Asignatura: Fronteras en el estudio de las biomoléculas  
Código: 32846  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Master Universitario en Biomoléculas y Dinámica Celular  
Nivel: Máster  
Tipo: Obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

- 6-7. CASOS DE ESTUDIO QUE UTILIZAN CRISTALOGRAFÍA DE RAYOS X.
- 8-9. ESPECTROSCOPIA DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR (RMN).
- 10-11. CASOS DE ESTUDIO QUE UTILIZAN ESPECTROSCOPIA RMN.
12. DISCUSIÓN SOBRE EL ESTUDIO DE BIOMOLÉCULAS MEDIANTE CRISTALOGRAFÍA DE RAYOS X O ESPECTROSCOPIA RMN.
- 13-14. MICROSCOPIA Y TOMOGRAFÍA ELECTRÓNICAS.
- 15-16. CASOS DE ESTUDIO QUE UTILIZAN MICROSCOPIA O TOMOGRAFÍA ELECTRÓNICAS.
- 17-18. TÉCNICAS DE MOLÉCULA ÚNICA: Microscopía de Fuerzas Atómicas, Pinzas Ópticas y Magnéticas.
19. CASOS DE ESTUDIO QUE UTILIZAN TÉCNICAS DE MOLÉCULA ÚNICA.
20. DISCUSIÓN SOBRE EL ESTUDIO DE BIOMOLÉCULAS MEDIANTE MICROSCOPIA O TOMOGRAFÍA ELECTRÓNICAS O TÉCNICAS DE MOLÉCULA ÚNICA.
21. BIOINFORMÁTICA ESTRUCTURAL.
22. CASOS DE ESTUDIO / PRÁCTICA DE BIOINFORMÁTICA ESTRUCTURAL.
23. TÉCNICAS BIOFÍSICAS: Dicroísmo Circular, Espectroscopía de Fluorescencia, Calorimetría, Ultracentrifugación Analítica.
24. CASOS DE ESTUDIO QUE UTILIZAN TÉCNICAS BIOFÍSICAS.
25. DISCUSIÓN SOBRE EL ESTUDIO DE BIOMOLÉCULAS MEDIANTE BIOINFORMÁTICA ESTRUCTURAL O TÉCNICAS BIOFÍSICAS.
- 26-27. VISITAS INTERACTIVAS A LABORATORIOS DE CRISTALOGRAFÍA DE RAYOS X.
28. VISITA INTERACTIVA A LABORATORIOS DE ESPECTROSCOPIA RMN.
- 29-30. VISITAS INTERACTIVAS A LABORATORIOS DE MICROSCOPIA ELECTRÓNICA.
31. VISITA INTERACTIVA A LABORATORIOS DE TÉCNICAS DE MOLÉCULA ÚNICA.



Asignatura: Fronteras en el estudio de las biomoléculas  
Código: 32846  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Master Universitario en Biomoléculas y Dinámica Celular  
Nivel: Máster  
Tipo: Obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

## 32. EXAMEN FINAL.

### PROGRAMME

It consists of 32 contact sessions of 90 min each.

1. STRUCTURAL BIOLOGY- AN INTRODUCTION.

2-3. GENERAL PRINCIPLES ON THE STRUCTURE AND FUNCTION OF PROTEINS, NUCLEIC ACIDS AND BIOMOLECULAR COMPLEXES.

4-5. X-RAY CRYSTALLOGRAPHY.

6-7. CASE STUDIES USING X-RAY CRYSTALLOGRAPHY.

8-9. NUCLEAR MAGNETIC RESONANCE (NMR) SPECTROSCOPY.

10-11. CASE STUDIES USING NMR SPECTROSCOPY.

12. DISCUSSION ON THE STUDY OF BIOMOLECULES USING X-RAY CRYSTALLOGRAPHY OR NMR SPECTROSCOPY.

13-14. ELECTRON MICROSCOPY AND TOMOGRAPHY.

15-16. CASE STUDIES USING ELECTRON MICROSCOPY OR TOMOGRAPHY.

17-18. SINGLE-MOLECULE TECHNIQUES: Atomic Force Microscopy, Optical and Magnetic Tweezers.

19. CASE STUDIES USING SINGLE-MOLECULE TECHNIQUES.

20. DISCUSSION ON THE STUDY OF BIOMOLECULES USING ELECTRON MICROSCOPY OR TOMOGRAPHY OR SINGLE-MOLECULE TECHNIQUES.

21. STRUCTURAL BIOINFORMATICS.

22. CASE STUDIES / PRACTICAL WORK IN STRUCTURAL BIOINFORMATICS.

23. BIOPHYSICAL TECHNIQUES: Circular dichroism, Fluorescence spectroscopy, Calorimetry, Analytical ultracentrifugation.

24. CASE STUDIES USING BIOPHYSICAL TECHNIQUES.



Asignatura: Fronteras en el estudio de las biomoléculas  
Código: 32846  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Master Universitario en Biomoléculas y Dinámica Celular  
Nivel: Máster  
Tipo: Obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

25. DISCUSSION ON THE STUDY OF BIOMOLECULES USING STRUCTURAL BIOINFORMATICS OR BIOPHYSICAL TECHNIQUES.

26-27. INTERACTIVE VISITS TO X-RAY CRYSTALLOGRAPHY FACILITIES.

28. INTERACTIVE VISIT TO NMR SPECTROSCOPY FACILITIES.

29-30. INTERACTIVE VISITS TO ELECTRON MICROSCOPY FACILITIES.

31. INTERACTIVE VISIT TO SINGLE-MOLECULE FACILITIES.

32. FINAL EXAMINATION.

### 1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

#### A- MATERIAL DOCENTE:

Al principio del curso se subirá a la página Moodle de la asignatura el material docente que sea necesario. Este material será utilizado durante el desarrollo de las clases y otras actividades docentes a lo largo del curso.

#### B-LIBROS GENERALES DE BIOQUIMICA.

Es *esencial* que el alumno repase al comienzo de este curso los principios básicos sobre estructura y función de proteínas y ácidos nucleicos y sus complejos, que deberían haberse adquirido durante los estudios de Licenciatura o Grado. Para ello debe repasar el/los capítulos correspondientes en *uno* de los muchos libros de Bioquímica General publicados. No es necesario que sea una edición muy reciente. Algunas alternativas:

1-Mathews, Van Holde, Ahern, BIOCHEMISTRY, 4ºed Benjamin/ Cummings, 2012. Posiblemente los mejores capítulos básicos sobre estructura de proteínas y ácidos nucleicos. *Muy recomendado*.

2-Berg, Tymoczko, Stryer, BIOCHEMISTRY, Freeman, 2012.

3- Voet, Voet, BIOCHEMISTRY, 4ºed. Wiley 2010.

#### C-LIBROS SOBRE CONCEPTOS EN BIOLOGÍA ESTRUCTURAL.

Estos libros se indican sobre todo como diferentes alternativas para posibles consultas puntuales, y para aprender más sobre la estructura y función de biomoléculas; no se pretende que se utilicen como textos para este curso.



Asignatura: Fronteras en el estudio de las biomoléculas  
Código: 32846  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Master Universitario en Biomoléculas y Dinámica Celular  
Nivel: Máster  
Tipo: Obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

**4-Petsko, Ringe.** PROTEIN STRUCTURE AND FUNCTION. NSP, 2004. Cubre de modo elemental diferentes aspectos de estructura y función de proteínas. *Recomendado.*

**5-Whitford.** PROTEINS. STRUCTURE AND FUNCTION. Wiley, 2005. Muy básico, demasiado en algunos temas, pero muy apropiado para estudiar aspectos fundamentales de la estructura y función de proteínas. *Recomendado.*

**6- Williamson,** HOW PROTEINS WORK. Garland Science, 2012. Excelente para entender la estructura y función de proteínas, y muy actualizado. *Muy recomendado.*

**7-Gómez-Moreno, Sancho** (coordinadores). ESTRUCTURA DE PROTEÍNAS. Ed. Ariel, 2003. Cubre la mayoría de técnicas y muchos conceptos que se verán durante este curso. Excelente y muy completo. Incluye direcciones en Internet y prácticas de visualización de estructuras por ordenador. *Muy recomendado.*

**8-Creighton,** PROTEINS. STRUCTURE AND MOLECULAR PROPERTIES, 2ºed. Freeman, 1993. Excelente (aunque en bastantes aspectos se ha quedado muy anticuado. Se necesita una nueva edición). Útil para complementar las refs. 4-7 en algunos aspectos.

**9- Liljas y otros,** TEXTBOOK OF STRUCTURAL BIOLOGY, World Scientific, 2009. En gran medida trata sobre relaciones estructura-función en muchas proteínas importantes. Nivel avanzado. Muy actualizado.

**10-Branden, Tooze,** INTRODUCTION TO PROTEIN STRUCTURE, 2ºed. Garland, 1999. Excelente para entender la arquitectura de proteínas, pero no trata otros aspectos importantes. Algo anticuado. Nivel intermedio.

**11-Lesk,** INTRODUCTION TO PROTEIN SCIENCE. Oxford University Press, 2010. Nivel intermedio.

**12-Kyte,** STRUCTURE IN PROTEIN CHEMISTRY, 2ª ed. Garland, 2007. Relativamente completo pero tratamiento irregular en diversos aspectos. Nivel avanzado.

**13-Fersht,** STRUCTURE AND MECHANISM IN PROTEIN SCIENCE. Freeman, 1999. Para diferentes aspectos de la estabilidad y plegamiento de proteínas, de reconocimiento proteína-ligando y de catálisis enzimática. Nivel avanzado.

**14-Calladine, Drew,** UNDERSTANDING DNA, 2ºed. Academic Press, 1997. Muy bueno para entender ciertos aspectos de estructura secundaria y terciaria de DNA. Nivel intermedio. *Recomendado.*

**15-Sinden,** DNA STRUCTURE AND FUNCTION. Academic Press, 1994. Para estructura de DNA (aunque ciertos aspectos pueden requerir la consulta de otros libros). Algo anticuado. Nivel intermedio.

**16- Neidle,** PRINCIPLES OF NUCLEIC ACID STRUCTURE. Academic Press, 2008. Para estructura de ácidos nucleicos. Actualizado. Nivel intermedio. *Recomendado.*

**17- Blomfield, Crothers, Tinoco,** NUCLEIC ACIDS: STRUCTURE, PROPERTIES AND FUNCTION. University Science Books, 2000. Libro bastante completo. Nivel avanzado.





Asignatura: Fronteras en el estudio de las biomoléculas  
Código: 32846  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Master Universitario en Biomoléculas y Dinámica Celular  
Nivel: Máster  
Tipo: Obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

## D-LIBROS SOBRE TÉCNICAS EN BIOLOGÍA ESTRUCTURAL.

Estos libros se indican sobre todo para posibles consultas y ampliación de información sobre las diferentes técnicas en biología estructural para aquellos alumnos que tienen interés en iniciar su investigación utilizando algunas de estas técnicas; no se pretende que se utilicen como textos para este curso.

**18-Cantor, Schimmel, BIOPHYSICAL CHEMISTRY.** Freeman, 1980. Libro clásico y referencia sobre fundamentos químico-físicos de la Bioquímica y técnicas estructurales y biofísicas. Muy anticuado en muchos aspectos, pero no en muchos conceptos básicos. Avanzado.

**19-Van Holde, Johnson, Ho, PRINCIPLES OF PHYSICAL BIOCHEMISTRY.** Prentice Hall, 1998. Para entender en profundidad los fundamentos químico-físicos de la estructura de biomacromoléculas. Incluye explicación de los principios de diferentes técnicas en Biología Estructural y Biofísica. Avanzado.

**20- Nelson, BIOLOGICAL PHYSICS,** Freeman 2014. Una referencia sobre los principios de Biofísica. Muy actualizado. Avanzado.

**21-Rhodes, CRYSTALLOGRAPHY MADE CRYSTAL CLEAR,** 3ª ed. Academic Press, 2006. Un libro que permite entender claramente los fundamentos y técnica de la cristalografía de rayos X. Nivel intermedio.

**22-Blow, OUTLINE OF CRYSTALLOGRAPHY FOR BIOLOGISTS.** Oxford University Press, 2002. Similar a la referencia 21. Nivel intermedio.

**23- Rupp, BIOMOLECULAR CRYSTALLOGRAPHY: PRINCIPLES, PRACTISE, AND APPLICATION TO STRUCTURAL BIOLOGY.** Garland Science, 2010. Un libro de referencia. Nivel intermedio-avanzado.

**24- Carbajo, Neira, NMR FOR CHEMISTS AND BIOLOGISTS.** Springer, 2013. Explica los fundamentos de la espectroscopía NMR. Nivel intermedio.

**25- Evans, Biomolecular NMR Spectroscopy.** Oxford University Press, 1995. Algo anticuado pero muy bueno. Nivel avanzado.

**26- Frank, THREE DIMENSIONAL ELECTRON MICROSCOPY OF MACROMOLECULAR ASSEMBLIES,** Academic Press, 1996. Comúnmente denominado "La Biblia" del campo del análisis estructural de macromoléculas biológicas mediante microscopía electrónica tridimensional. Los primeros capítulos son más generales, pasando a nivel avanzado en los siguientes.

**27- Frank, METHODS FOR THREE-DIMENSIONAL VISUALIZATION OF STRUCTURES IN THE CELL,** Springer, 2010. Recapitulación de las técnicas de análisis estructural en tomografía electrónica. Nivel intermedio.

**28- Lesk, INTRODUCTION TO BIOINFORMATICS.** Oxford University Press, 2008. Buena introducción a las bases de datos y bioinformática. Nivel intermedio.

**29- Bourne, Weissig, STRUCTURAL BIOINFORMATICS.** WILEY-LISS, 2009. Trata diferentes conceptos y aproximaciones de bioinformática estructural. Nivel Avanzado.



Asignatura: Fronteras en el estudio de las biomoléculas  
Código: 32846  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Master Universitario en Biomoléculas y Dinámica Celular  
Nivel: Máster  
Tipo: Obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

**30- Pazos, Chagoyen, PRACTICAL PROTEIN BIOINFORMATICS.** Springer, 2015. Recetas prácticas para utilizar herramientas bioinformáticas accesibles en red para el análisis de proteínas.

Para otras referencias avanzadas o específicas (incluyendo artículos de revisión) consultar bases bibliográficas y/o con los profesores.

#### E- ALGUNAS DIRECCIONES DE INTERNET:

Enlaces a bases de datos y análisis estructurales:

<http://www.rcsb.org/pdb>

Acceso al Protein Data Bank (PDB). Contiene archivos con las coordenadas atómicas de las proteínas y ácidos nucleicos cuya estructura ha sido resuelta, y otra información relevante. Estas coordenadas son necesarias para la visualización y manipulación de estructuras en el ordenador.

<http://ndbserver.rutgers.edu/NDB/ndb.html>

Acceso al Nucleic Acids Data bank (NDB). Contiene archivos con las coordenadas atómicas de todos los ácidos nucleicos cuya estructura ha sido resuelta, y otra información relevante. Estas coordenadas son necesarias para la visualización y manipulación de estructuras en el ordenador.

<http://www.ebi.ac.uk/pdbe/emdb/>

Acceso a la base de datos de mapas estructurales obtenidos mediante microscopía electrónica tridimensional (formalmente, una parte de PDB). Su contenido es amplio, estando en su mayor parte constituido por estructuras de macromoléculas, pero conteniendo, también, una cantidad creciente de tomogramas.

<http://www.ncbi.nlm.nih.gov>

National Center for Biotechnology Information (NCBI). Base de datos anotada sobre secuencias de ácidos nucleicos (GenBank). En coordinación con el European Bioinformatics Institute. Análisis de secuencias y estructuras y diversos enlaces

<http://www.ebi.ac.uk>

European Bioinformatics Institute (EBI). Conexión a muchas bases de datos relacionadas con biomoléculas. Base de datos anotada sobre secuencias de ácidos nucleicos (EMBL Data Library). Análisis de secuencias y estructuras y diversos enlaces.

<http://www.expasy.ch>



Asignatura: Fronteras en el estudio de las biomoléculas  
Código: 32846  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Master Universitario en Biomoléculas y Dinámica Celular  
Nivel: Máster  
Tipo: Obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

Swiss Institute of Bioinformatics. Base de datos anotada sobre secuencias de proteínas (SWISS-PROT). En colaboración con la EMBL Data Library. Análisis de secuencias y estructuras y diversos enlaces.

Enlaces a programas de gráficos moleculares:

<http://www.umass.edu/microbio/rasmol/index2.htm>

Acceso a la página del programa de visualización de estructuras RasMol. Este programa, de libre acceso, puede importarse a través de la red en versiones apropiadas a PC o MacIntosh, junto al correspondiente manual, y utilizarse para la visualización de estructuras de proteínas o ácidos nucleicos. Para ello se necesita además importar del PDB o del NDB (direcciones anteriores) los archivos de coordenadas atómicas de las moléculas de interés. Existen otros programas de visualización, incluyendo Protein Explorer que es una versión más actual basada en RasMol, o Pymol.

<http://www.usm.maine.edu/~rhodes/RasTut>

Un "tutorial" sobre RasMol.

Enlaces a cursos y recursos educativos sobre estructura de proteínas:

<http://www.cryst.bbk.ac.uk/PPS2/>

Curso on-line sobre estructura de proteínas. No sustituye a los libros!

<http://www.rcsb.org/pdb/education.html>

Lista de recursos educativos en Internet que contemplan la estructura de proteínas.

Enlaces sobre cristalografía:

<http://xray.bmc.uu.se/terese/tutorials.html>

Cristalización de proteínas.

<http://www.xtal.iqfr.csic.es/Cristalografia/>  
(en castellano)

<http://www-structmed.cimr.cam.ac.uk/course.html>

<http://www.eserc.stonybrook.edu/ProjectJava/Bragg/index.html>.

Explicación gráfica de la ley de Bragg.

<http://www.ytbl.york.ac.uk/~cowtan/fourier/fourier.html>

<http://www.ytbl.york.ac.uk/~cowtan/sfapplet/sfintro.html>



Asignatura: Fronteras en el estudio de las biomoléculas  
Código: 32846  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Master Universitario en Biomoléculas y Dinámica Celular  
Nivel: Máster  
Tipo: Obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

Enlaces sobre técnicas de molécula única:

<http://web.stanford.edu/group/blocklab/Optical%20Tweezers%20Introduction.htm>

Aspectos básicos de pinzas ópticas.

<http://www.nature.com/nmeth/journal/v5/n6/full/nmeth.1218.html>

Revisión general sobre microscopía de fuerzas atómicas, pinzas ópticas y magnéticas.

#### A- TEACHING MATERIAL:

Several documents will be uploaded to the Moodle webpage at the beginning of this course. This material will be used during lectures and other teaching activities along this course.

#### B-GENERAL BIOCHEMISTRY BOOKS:

It will be *essential* for the student to revise and remember, at the beginning of this course, the basic principles on the structure and function of proteins and nucleic acids and their complexes. This knowledge should have been acquired during the B.Sc. studies. The student should read and understand the appropriate chapters in one of the many General Biochemistry books available. There is no need to use a very recent edition. Some alternatives:

1-Mathews, Van Holde, Ahern, BIOCHEMISTRY, 4<sup>ed</sup> Benjamin/ Cummings, 2012. Arguably some of the best basic chapters on protein and nucleic acid structure. *Highly recommended*.

2-Berg, Tymoczko, Stryer, BIOCHEMISTRY, Freeman, 2012.

3- Voet, Voet, BIOCHEMISTRY, 4<sup>ed</sup>. Wiley 2010.

#### C-BOOKS ON PRINCIPLES IN STRUCTURAL BIOLOGY.

These books are listed here only to provide different alternatives for consultation, and to learn more on the structure and function of biomolecules; they are not intended to be used as textbooks for this course!

4-Petsko, Ringe. PROTEIN STRUCTURE AND FUNCTION. NSP, 2004. Basic coverage of different aspects of protein structure. Rather adequate to study fundamental aspects of protein structure and function. *Recommended*.



Asignatura: Fronteras en el estudio de las biomoléculas  
Código: 32846  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Master Universitario en Biomoléculas y Dinámica Celular  
Nivel: Máster  
Tipo: Obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

**5-Whitford.** PROTEINS. STRUCTURE AND FUNCTION. Wiley, 2005. Very basic, too basic regarding some topics, but fine to study fundamental aspects of protein structure and function. *Recommended.*

**6- Williamson,** HOW PROTEINS WORK. Garland Science, 2012. Excellent book to understand protein structure and function. Up-to-date. *Highly recommended.*

**7-Gómez-Moreno, Sancho** (coordinators). ESTRUCTURA DE PROTEÍNAS. Ed. Ariel, 2003. Includes most of the techniques and many concepts that will be covered during this course. Excellent and complete. It includes Internet addresses and laboratory experiments on computer graphics to visualize macromolecular structure. *Highly recommended.*

**8-Creighton,** PROTEINS. STRUCTURE AND MOLECULAR PROPERTIES, 2<sup>o</sup>ed. Freeman, 1993. Excellent (although for a number of topics it is now rather outdated. A new edition is needed). Useful to complement some aspects treated in refs. 4-7.

**9- Liljas et al.,** TEXTBOOK OF STRUCTURAL BIOLOGY, World Scientific, 2009. A book that focuses on structure-function relationships in many important proteins. Up-to-date. Advanced level.

**10-Branden, Tooze,** INTRODUCTION TO PROTEIN STRUCTURE, 2<sup>o</sup>ed. Garland, 1999. An excellent book to understand protein architecture, but other equally important aspects of protein structure are not covered. Somewhat outdated. Intermediate level.

**11-Lesk,** INTRODUCTION TO PROTEIN SCIENCE. Oxford University Press, 2010. Intermediate level.

**12-Kyte,** STRUCTURE IN PROTEIN CHEMISTRY, 2<sup>a</sup> ed. Garland, 2007. Relatively complete, but some topics are treated in a somewhat irregular way. Advanced level.

**13-Fersht,** STRUCTURE AND MECHANISM IN PROTEIN SCIENCE. Freeman, 1999. For understanding protein stability and folding, molecular recognition and enzymatic catalysis. Advanced level.

**14-Calladine, Drew,** UNDERSTANDING DNA, 2<sup>o</sup>ed. Academic Press, 1997. Very good for understanding certain difficult-to-grasp aspects of DNA structure. Intermediate level.

**15-Sinden,** DNA STRUCTURE AND FUNCTION. Academic Press, 1994. Rather complete regarding DNA structure (but some topics may require the consultation of other books). Somewhat outdated.

**16- Neidle,** PRINCIPLES OF NUCLEIC ACID STRUCTURE. Academic Press, 2008. To understand nucleic acid structure. Up-to-date. Intermediate level. *Recommended.*

**17- Blomfield, Crothers, Tinoco,** NUCLEIC ACIDS: STRUCTURE, PROPERTIES AND FUNCTION. University Science Books, 2000. A rather complete book. Advanced level.

D-BOOKS ON STRUCTURAL BIOLOGY TECHNIQUES.



Asignatura: Fronteras en el estudio de las biomoléculas  
Código: 32846  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Master Universitario en Biomoléculas y Dinámica Celular  
Nivel: Máster  
Tipo: Obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

These books are listed here only for consultation and to learn more on structural biology techniques, especially for those students who are considering doing research work in Structural Biology; they are not intended to be used as textbooks for this course!

**18-Cantor, Schimmel, BIOPHYSICAL CHEMISTRY.** Freeman, 1980. Classic, reference book on the physico-chemical foundations of Biochemistry and structural and biophysical techniques. Outdated in many aspects, but not in its treatment of many basic concepts. Advanced level.

**19-Van Holde, Johnson, Ho, PRINCIPLES OF PHYSICAL BIOCHEMISTRY.** Prentice Hall, 1998. For an in-depth understanding of the physico-chemical principles of macromolecular structure. Includes explanations on the principles of several structural and biophysical techniques. Advanced level.

**20- Nelson, BIOLOGICAL PHYSICS.** Freeman, 2014. A reference book on the principles of Biophysics. Up-to-date. Advanced level.

**21-Rhodes, CRYSTALLOGRAPHY MADE CRYSTAL CLEAR, 3<sup>rd</sup> ed.** Academic Press, 2006. For those wishing to understand the foundations and techniques of X-ray crystallography. Intermediate level.

**22-Blow, OUTLINE OF CRYSTALLOGRAPHY FOR BIOLOGISTS.** Oxford University Press, 2002. Similar to ref. 21. Intermediate level.

**23- Rupp, BIOMOLECULAR CRYSTALLOGRAPHY: PRINCIPLES, PRACTISE, AND APPLICATION TO STRUCTURAL BIOLOGY.** Garland Science, 2010. A reference book. Intermediate-advanced level.

**24- Carbajo, Neira, NMR FOR CHEMISTS AND BIOLOGISTS.** Springer, 2013. It explains the principles of NMR spectroscopy. Intermediate level.

**25- Evans, BIOMOLECULAR NMR SPECTROSCOPY.** Oxford University Press, 1995. Somewhat outdated but very good. Advanced level.

**26- Frank, THREE DIMENSIONAL ELECTRON MICROSCOPY OF MACROMOLECULAR ASSEMBLIES,** Academic Press, 1996. Usually referred as the "Bible" of three-dimensional electron microscopy, as applied to non-crystalline macromolecular structures. The first chapters are more general, to then change to an advanced level.

**27- Frank, METHODS FOR THREE-DIMENSIONAL VISUALIZATION OF STRUCTURES IN THE CELL,** Springer, 2010. A very good compendium of structural analysis tools for electron tomography. Intermediate level.

**28- Lesk, INTRODUCTION TO BIOINFORMATICS.** Oxford University Press. 2008. Good introduction to databases and bioinformatics. Intermediate level.

**29- Bourne, Weissig, STRUCTURAL BIOINFORMATICS.** WILEY-LISS, 2009. It deals extensively with different principles and procedures in structural bioinformatics. Advanced level.

**30- Pazos, Chagoyen, PRACTICAL PROTEIN BIOINFORMATICS.** Springer, 2015. Practical recipes for using web-accessible bioinformatics tools for protein analysis.



Asignatura: Fronteras en el estudio de las biomoléculas  
Código: 32846  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Master Universitario en Biomoléculas y Dinámica Celular  
Nivel: Máster  
Tipo: Obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

For more advanced and/or specific references (including review articles), please search the bibliography data bases, or talk to the supervisors or lecturers.

#### E- SOME INTERNET ADDRESSES:

Links to structural databases and resources:

<http://www.rcsb.org/pdb>

Access to Protein Data Bank (PDB). It contains coordinate files for all proteins and nucleic acids whose structure has been solved, and other relevant information. The coordinate files are needed for visualization and manipulation of the structural models using a computer.

<http://ndbserver.rutgers.edu/NDB/ndb.html>

Access to Nucleic Acids Data bank (NDB). It contains files with the atomic coordinates of those nucleic acids whose structure has been solved, and other relevant information. The coordinate files are needed for visualization and manipulation of the structural models using a computer.

<http://www.ebi.ac.uk/pdbe/emdb/>

Access to the data base containing structural maps obtained by three-dimensional electron microscopy (formally, a project within PDB). It contains from macromolecular structures to a growing number of electron tomograms.

<http://www.ncbi.nlm.nih.gov>

National Center for Biotechnology Information (NCBI). Nucleic acid sequence database (GenBank). In coordination with the European Bioinformatics Institute. Sequence and structure analysis and various links.

<http://www.ebi.ac.uk/pdbe/emdb/>

Access to the data base containing structural maps obtained by three-dimensional electron microscopy (formally, a project within PDB). It contains from macromolecular structures to a growing number of electron tomograms.

<http://www.ebi.ac.uk>

European Bioinformatics Institute (EBI). Provides access to many databases related to biomolecules. Nucleic acid sequence database (GenBank). Sequence and structure analysis and various links.

<http://www.expasy.ch>



Asignatura: Fronteras en el estudio de las biomoléculas  
Código: 32846  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Master Universitario en Biomoléculas y Dinámica Celular  
Nivel: Máster  
Tipo: Obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

Swiss Institute of Bioinformatics. Annotated protein sequence database (SWISS-PROT). In collaboration with EMBL Data Library. Sequence and structure analysis and various links.

Links to molecular graphics programs:

<http://www.umass.edu/microbio/rasmol/index2.htm>

Access to RasMol program webpage. RasMol is freeware, can be downloaded in PC or Mac versions together with an instruction manual, and used to visualize protein and nucleic acid structures. To do the latter, the coordinate files of the molecules of interest must be downloaded from the PDB (previous addresses). There are other molecular graphics programs, including Protein Explorer (a RasMol-based version), or Pymol.

<http://www.usm.maine.edu/~rhodes/RasTut>  
A RasMol tutorial.

Links to courses and educational resources on protein structure:

<http://www.cryst.bbk.ac.uk/PPS2/>

On-line course on protein structure. It does not replace the books on this subject!

<http://www.rcsb.org/pdb/education.html>

List of education resources in Internet about protein structure.

Links on crystallography:

<http://xray.bmc.uu.se/terese/tutorials.html>.

Crystallization of proteins.

<http://www.xtal.iqfr.csic.es/Cristalografia/>  
(in Spanish)

<http://www-structmed.cimr.cam.ac.uk/course.html>

<http://www.eserc.stonybrook.edu/ProjectJava/Bragg/index.html>.

Graphical explanation of Bragg's law.

<http://www.ytbl.york.ac.uk/~cowtan/fourier/fourier.html>

<http://www.ytbl.york.ac.uk/~cowtan/sfapplet/sfintro.html>

Links on single molecule techniques:





Asignatura: Fronteras en el estudio de las biomoléculas  
Código: 32846  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Master Universitario en Biomoléculas y Dinámica Celular  
Nivel: Máster  
Tipo: Obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

<http://web.stanford.edu/group/blocklab/Optical%20Tweezers%20Introduction.htm>

Basic aspects on optical tweezers.

<http://www.nature.com/nmeth/journal/v5/n6/full/nmeth.1218.html>

A general review on atomic force microscopy, optical and magnetic tweezers.

## 2. Métodos docentes / Teaching methodology

### 1. Clases teóricas interactivas.

Los profesores explicarán los conceptos y las diferentes técnicas más utilizadas hoy día en Biología Estructural, utilizando material gráfico proyectado y la pizarra. Se recurrirá de modo frecuente a ejemplos y aplicaciones (casos de estudio) que destaquen algunos de los importantes descubrimientos que la aplicación de estas técnicas ha permitido realizar. Se intercambiarán preguntas y respuestas entre alumnos, profesores y coordinadores de la asignatura.

### 2. Discusiones entre los supervisores y los alumnos de los contenidos tratados en clases anteriores.

Estas sesiones de discusión y debate estarán dedicadas principalmente a clarificar dudas e integrar lo tratado en clases anteriores sobre diferentes técnicas de Biología Estructural y sus aplicaciones a diferentes estudios sobre la estructura y función de biomoléculas importantes. Tratarán además de dar una visión integrada de la Biología Estructural y de su extrema importancia en las Biociencias Moleculares y sus aplicaciones.

### 3. Visitas interactivas y prácticas.

Se visitarán diferentes instalaciones y laboratorios donde se realizan estudios con diferentes técnicas muy importantes de Biología Estructural. En estas visitas se planteará y demostrará a los estudiantes el modo de resolver problemas reales y actuales en Biología Estructural mediante el uso de técnicas avanzadas. Se trata de poner en contacto directo a los estudiantes con algunas de las instalaciones y técnicas complejas que se utilizan hoy en el estudio de la estructura y función de biomoléculas. Se realizará además alguna práctica sencilla de Bioinformática estructural.

### 4. Tutorías individuales o en pequeños grupos.

Además de las actividades presenciales anteriores, se podrán realizar tutorías individuales o en pequeños grupos a petición de los alumnos interesados, y en lugar, fecha y hora fijados previamente por los interesados de acuerdo con el profesor, siempre sin interferir con otras actividades programadas.



Asignatura: Fronteras en el estudio de las biomoléculas  
Código: 32846  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Master Universitario en Biomoléculas y Dinámica Celular  
Nivel: Máster  
Tipo: Obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

### 1. Interactive lectures.

Concepts and current Structural Biology techniques will be explained by the lecturers. Different examples and applications (case studies) will be presented to illustrate important discoveries that resulted from application of those techniques. Questions and answers will be exchanged between students, lecturers and course coordinators.

### 2. Discussions between supervisors and students of the contents presented in previous sessions.

These discussion sessions will be mainly devoted to clarify some doubts and integrate the contents presented in previous sessions on different Structural Biology techniques and their application to different studies on the structure and function of important biomolecules. These sessions will also attempt to convey an integrated view of Structural Biology and its extreme importance for the Biomolecular Biosciences and their applications.

### 3. Interactive visits and hands-on activities.

Different Structural Biology facilities and laboratories will be visited. During these visits real scientific problems and advanced Structural Biology approaches to solve them will be presented to the student. The aim is to put the student into direct contact with some of the facilities and complex techniques used to study the structure and function of biomolecules. A hands-on activity on Structural Bioinformatics will be included.

### 4. Tutorials for individual students or reduced groups.

In addition to the above in-classroom teaching activities, tutorials will be available upon request for individual students or reduced groups. The place, date and time will be appointed by the students in agreement with their supervisor, without interfering with any other programmed activity.

## 3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

		Nº de horas / Nº hours	Porcentaje/ Percent
Presencial/ In- classroom	Clases teóricas interactivas / <b>Interactive lectures</b>	37.5 h	32%
	Sesiones prácticas: visitas interactivas / <b>Practical sessions: interactive visits</b>	9 h	



Asignatura: Fronteras en el estudio de las biomoléculas  
Código: 32846  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Master Universitario en Biomoléculas y Dinámica Celular  
Nivel: Máster  
Tipo: Obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

activities			
	Realización del examen final / <b>Final examination</b>	3 h	
No presencial/ <b>Out-of-classroom activities</b>	Preparación de preguntas y aspectos de debate / <b>preparing questions and aspects to be discussed</b>	16 h	68%
	Resolución de cuestiones y problemas / <b>Work on solving questions and problems</b>	16 h	
	Estudio y comprensión de conceptos / <b>Study and understanding concepts and techniques</b>	70 h	
<b>Carga total de horas de trabajo / Total workload (hours)</b>		<b>150 h</b>	

#### 4. Métodos de evaluación y porcentaje en la calificación final / **Evaluation procedures and weight of components in the final grade**

La presencia del estudiante en todas las clases es necesaria para poder obtener la máxima calificación, ya que la evaluación estará basada en parte en aspectos que requieren la participación activa del alumno en clase (preguntas y respuestas en la resolución de problemas, etc.). En concreto, la evaluación se realizará en función de lo siguiente:

##### 1. Un examen final escrito.

Se realizará un examen de tipo test de unas 20 preguntas (el número es orientativo), con cuatro posibles respuestas por pregunta. Para un examen de 20 preguntas, cada solución correcta contará +0.5 puntos, y cada solución incorrecta -0.125 puntos, sobre una calificación máxima de 10 puntos.

2. Contribuciones a la resolución de problemas en clase. Por ejemplo, mediante respuestas a cuestiones que el profesor podrá plantear para resolver en el momento en la clase; las preguntas del alumno, o sus respuestas a las preguntas de otros en clase; y la participación en la discusión general conjunta de la asignatura.

3. Análisis crítico de artículos y casos de estudio. Por ejemplo, mediante la presentación oral durante clases especiales de discusión o por escrito (a decidir por los coordinadores) de una o más cuestiones planteadas a partir de un artículo científico publicado, o de un estudio de investigación comentado por alguno de los profesores.

La nota final se obtendrá del siguiente modo:

1. Examen final escrito	60%
2. Contribuciones a la resolución de problemas en clase	10%
3. Análisis crítico de artículos y casos de estudio	30%



Asignatura: Fronteras en el estudio de las biomoléculas  
Código: 32846  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Master Universitario en Biomoléculas y Dinámica Celular  
Nivel: Máster  
Tipo: Obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

El alumno que no se presente al examen final se considerará no evaluado en la convocatoria correspondiente.

Para la convocatoria extraordinaria del mismo curso se guardarán las notas obtenidas durante el curso en las evaluaciones del puntos 2 y 3, y se realizará un nuevo examen escrito de similar dificultad al realizado en la convocatoria ordinaria. Los porcentajes asignados a los puntos 1, 2 y 3 se mantendrán como en la convocatoria ordinaria.

Attendance to all classroom sessions is required for the student because the evaluation will be partly based on the active participation of the student in classroom sessions all along the course (that will include questions and answers, problem solving, etc.). Specifically, the evaluation will consider the following aspects:

**1. A written final examination.**

The examination will consist of a written exercise including about 20 questions and problems (number is orientative), each containing four possible answers. For a 20-questions exam, +0.5 point will be given for each correct answer, and -0.125 point will be given for each incorrect answer, for a maximum possible mark of 10 points.

**2. Contributions to solving problems in the classroom.**

For example, answering a few problems and questions the supervisor may present to solve on the spot during the lectures; active participation in asking questions and/or answering questions by others during the lectures; and participation in the general collective discussion.

**3. Critical analysis of research articles and case studies.** For example, by oral presentation during special classes for discussion, or in writing (to be decided by the coordinators), of questions arising from a published research article, or a research study that has been commented on by one of the lecturers.

The final mark will be obtained as follows:

1. Final written examination:	60%
2. Contribution to solving problems in the classroom	10%
3. Critical analysis of research articles and case studies	30%

Students not present in the written final examination will be considered as non-evaluated in the corresponding evaluation.



Asignatura: Fronteras en el estudio de las biomoléculas  
Código: 32846  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Master Universitario en Biomoléculas y Dinámica Celular  
Nivel: Máster  
Tipo: Obligatoria  
Nº de créditos: 6 ECTS

For the extraordinary (second-chance) evaluation, the marks obtained in the ordinary evaluation of the same academic term for point 2 and 3 will be maintained. A new written final examination of the same level of difficulty will be carried out and evaluated. The percentages assigned to points 1, 2 and 3 will be as in the ordinary evaluation.

## 5. Cronograma\* / Course calendar\*

Semana Week	Contenido Contents	Horas presenciales Contact hours	Horas no presenciales Independent study time
1	sessions 1-5		
2	sessions 6-10		
3	sessions 11-15		
4	sessions 16-20		
5	sessions 21-25		
	Sessions 26,27 (interactive visits) (dates pending)		
	Session 28 (interactive visit) (date pending)		
	Sessions 29,30 (interactive visits) (dates pending)		
	Session 31, interactive visit (date pending)		
	Session 32 (final examination) (date pending)		

\*Este cronograma tiene únicamente carácter orientativo. La distribución semanal exacta de horas presenciales figura en el horario académico oficial. La distribución semanal de horas no presenciales se deja al buen criterio del estudiante, que es quien mejor puede decidir como optimizar su tiempo de estudio personal

\*This chronogram provides an orientation only. The precise schedule of in-classroom activities and interactive visits are indicated in the official academic schedule. The weekly distribution of independent study time is left to the student, the one who can better decide how to optimize his/her personal study time.