



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

1.3. Tipo / Course type

Formación obligatoria / Compulsory subject

1.4. Nivel / Course level

Máster / Master

1.5. Curso / Year

1º / 1st

1.6. Semestre / Semester

1º / 1st

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 at least B2) 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

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

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

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.
- 26-31. VISITAS INTERACTIVAS A LABORATORIOS QUE UTILIZAN DIFERENTES TÉCNICAS FUNDAMENTALES PARA EL ESTUDIO DE BIOMOLÉCULAS.
32. EXAMEN FINAL.

PROGRAMME

It consists of 32 contact sessions of 90 min each.



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. 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.
25. DISCUSSION ON THE STUDY OF BIOMOLECULES USING STRUCTURAL BIOINFORMATICS OR BIOPHYSICAL TECHNIQUES.
- 26-31. INTERACTIVE VISITS TO LABORATORIES THAT USE DIFFERENT FUNDAMENTAL TECHNIQUES FOR THE STUDY OF BIOMOLECULES.
32. FINAL EXAMINATION.



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

1.13. 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, 4ª ed. Benjamin/ Cummings, 2012. Posiblemente los mejores capítulos básicos sobre estructura de proteínas y ácidos nucleicos. *Muy recomendado.*

2-Berg, Tymoczko, Stryer, BIOCHEMISTRY, 7ª ed. Freeman, 2012.

3- Voet, Voet, BIOCHEMISTRY, 4ª ed. 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.

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



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

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.

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.



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

- 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.
- 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>



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

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>

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



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

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>

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:



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

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 4th ed, Benjamin/Cummings, 2012. Arguably some of the best basic chapters on protein and nucleic acid structure. *Highly recommended.*

2-Berg, Tymoczko, Stryer, BIOCHEMISTRY 7th ed, Freeman, 2012.

3- Voet, Voet, BIOCHEMISTRY 4th ed., 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.*

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, 2ºed. 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.



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

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^oed. 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^a 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^oed. 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.

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.



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

- 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, 3rd 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.

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.



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://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>

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.



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

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:

<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



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

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.

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



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

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 activities	Clases teóricas interactivas / Interactive lectures	37.5 h	32%
	Sesiones prácticas: visitas interactivas / Practical sessions: interactive visits	9 h	
	Realización del examen final / Final examination	3 h	
No presencial/ Out-of-classroom activities	Preparación de preguntas y aspectos de debate / preparing questions and aspects to be discussed	16 h	68%
	Resolución de cuestiones y problemas / Work on solving questions and problems	16 h	
	Estudio y comprensión de conceptos / Study and understanding concepts and techniques	70 h	
Carga total de horas de trabajo / Total workload (hours)		150 h	

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



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

La asistencia del estudiante en todas las clases es OBLIGATORIA. El alumno que no haya asistido a todas las clases y visitas o justificado por escrito sus ausencias adecuadamente (a juicio de los coordinadores de la asignatura) no será evaluado. El alumno que no se presente al examen final se considerará no evaluado.

La evaluación se realizará en función de lo siguiente:

1. Resolución de algunas cuestiones planteadas durante las sesiones de discusión en clase. Al final de cada sesión de discusión el alumno deberá responder por escrito a unas 3 preguntas de tipo test (número orientativo) con 4 posibles respuestas. Cada solución correcta contará +1 puntos, y cada solución incorrecta -0.25 puntos, sobre una calificación máxima igual al total de preguntas, que será después normalizada.

2. Un examen final escrito.

Se realizará un examen de tipo test de unas 20 preguntas de tipo test (número orientativo), con 4 posibles respuestas por pregunta. Para un examen de 20 preguntas, cada solución correcta contará +1 puntos, y cada solución incorrecta -0.25 puntos, sobre una calificación máxima igual al total de preguntas, que será después normalizada.

La nota final se obtendrá del siguiente modo:

1. Nota media de los tests realizados en las sesiones de discusión	25%
2. Nota del examen final escrito	75%

Para los alumnos suspendidos en convocatoria ordinaria, la convocatoria extraordinaria del mismo curso se realizará del siguiente modo:

1. Si el alumno ha aprobado el conjunto de tests escritos realizados durante el curso, se le mantendrá la nota conseguida en los mismos y solo deberá realizar un nuevo examen final. Si ha suspendido ese conjunto de tests realizados durante el curso, deberá realizar un nuevo test que contendrá el mismo número y tipo de preguntas que se plantearon en las sesiones de discusión.

2. Si el alumno ha aprobado el examen final en convocatoria ordinaria, se le mantendrá la nota conseguida en el mismo y solo deberá realizar de nuevo los tests indicados en el punto 1. Si ha suspendido el examen final en convocatoria ordinaria, deberá realizar un nuevo examen final del mismo tipo.

La nota final de la convocatoria extraordinaria se obtendrá utilizando los mismos porcentajes que para la ordinaria.



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

Para aquellos alumnos que no aprueben esta asignatura ni en la convocatoria ordinaria ni en la extraordinaria y se matriculen de nuevo en el siguiente curso académico: las notas no se guardarán de un curso al siguiente.

Attendance to all classroom sessions is **COMPULSORY**. Students who have not attended every session and visit or adequately justified in writing his/her absences (as estimated by the course coordinators) will not be evaluated. The student who fails to be present in the written final examination will be considered as non-evaluated.

The evaluation will consider the following aspects:

1. Answering a number of questions asked during discussion sessions in the classroom. At the end of each discussion session the student will answer in writing about 3 test questions (number is orientative), each containing 4 possible answers. +1 point will be given for each correct answer, and -0.25 point will be given for each incorrect answer, for a maximum possible mark equal to the number of questions asked. This mark will be later normalized.

2. A written final examination.

The final examination will consist of a written exercise including about 20 questions and problems (number is orientative), each containing 4 possible answers. +1 point will be given for each correct answer, and -0.25 point will be given for each incorrect answer, for a maximum possible mark equal to the number of questions asked. This mark will be later normalized.

The final mark will be obtained as follows:

- | | |
|---|-----|
| 1. Average mark in written tests completed during discussion sessions | 25% |
| 2. Mark obtained in the final written examination: | 75% |

Students who did not pass the ordinary (first chance) evaluation, will have an extraordinary (second-chance) opportunity for evaluation during the same academic year, that will be organized as follows:

1. If the student passed the ensemble of written tests carried out during the discussion sessions, the corresponding mark he/she obtained will still be valid, and he/she will have to pass only a new written final examination. If he/she did not pass the ensemble of written tests during the course, he/she will have to pass a new written test that will contain the same number and type of questions asked during the discussion sessions in the classroom.

2. If the student passed the final examination, the corresponding mark he/she obtained will still be valid, and he/she will have to pass only a test similar to



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

those carried out during the discussion sessions as indicated in point 1. If the student did not pass the final examination, he/she will have to pass a second final examination of the same type.

The final mark obtained in the extraordinary evaluation will be obtained by applying the percentages used for the ordinary evaluation.

For those students who passed neither the ordinary nor the extraordinary evaluation and decide to enroll again in this course the next academic year: No mark obtained in this course during the present academic year will be used for evaluation the following year.

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		
6	sessions 26-31, interactive visits (dates 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 person best suited to decide how to optimize his or her personal study time.