

# DETERMINACIÓN DE LA ESTRUCTURA DE PROTEÍNAS MEDIANTE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR

Curso 2020-2021

(Fecha última actualización: 11/07/2020)

(Fecha de aprobación en Comisión Académica del Máster: 20/07/2020)

| SEMESTRE  | CRÉDITOS | CARÁCTER   | TIPO DE ENSEÑANZA | IDIOMA DE IMPARTICIÓN |
|---|----------|--|-------------------|-----------------------|
| 1º  | 3        | Optativa   | Presencial        | Español               |
| <b>MÓDULO</b>   |          |  |                   |                       |
| <b>MATERIA</b>  |          |  |                   |                       |
| <b>CENTRO RESPONSABLE DEL TÍTULO</b>  |          | Escuela Internacional de Posgrado  |                   |                       |
| <b>MÁSTER EN EL QUE SE IMPARTE</b>  |          | <b>Máster Universitario en Biotecnología</b>   |                   |                       |
| <b>CENTRO EN EL QUE SE IMPARTE LA DOCENCIA</b>  |          | Facultad de Ciencias   |                   |                       |
| <b>PROFESORES<sup>(1)</sup></b>   |          |  |                   |                       |
| <b>Francisco Conejero Lara</b>  |          |  |                   |                       |
| <b>DIRECCIÓN</b>  |          | Dpto. de Química Física, Edificio II de Química, 3ª planta, Facultad de Ciencias.<br>Teléfono: 958242371; Correo electrónico: <a href="mailto:conejero@ugr.es">conejero@ugr.es</a> |                   |                       |
| <b>TUTORÍAS</b>   |          | Lunes, miércoles y viernes, de 9 a 11 horas.   |                   |                       |
| <b>DIRECCIÓN</b>  |          |  |                   |                       |
| <b>TUTORÍAS</b>   |          |  |                   |                       |
| <b>DIRECCIÓN</b>  |          |  |                   |                       |
| <b>TUTORÍAS</b>   |          |  |                   |                       |
| <b>COMPETENCIAS GENERALES Y ESPECÍFICAS</b>   |          |  |                   |                       |
| <b>COMPETENCIAS BÁSICAS Y GENERALES</b>   |          |  |                   |                       |
| CB6 - Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación |          |  |                   |                       |

<sup>1</sup> Consulte posible actualización en Acceso Identificado > Aplicaciones > Ordenación Docente

(∞) Esta guía docente debe ser cumplimentada siguiendo la "Normativa de Evaluación y de Calificación de los estudiantes de la Universidad de Granada" ([http://secretariageneral.ugr.es/pages/normativa/fichasugr/ngc7121/!](http://secretariageneral.ugr.es/pages/normativa/fichasugr/ngc7121/))



- CB7 - Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio
- CB8 - Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios
- CB9 - Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades
- CB10 - Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.

### COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

- CE1 - Identificar, diseñar, implementar e interpretar métodos Biotecnológicos.
- CE2 - Organizar y diseñar actividades en el campo de la experimentación en Biotecnología.
- CE3 - Manejar las tecnologías de la información para la adquisición, procesamiento y difusión de resultados en investigación.
- CE4 - Emitir juicios en función de criterios y razonamiento crítico y aprender a reconocer los parámetros de calidad en investigación.
- CE6 - Trabajar en equipo y abordar los problemas de una forma interdisciplinar.
- CE9 - Reconocer y adaptarse a la diversidad y multiculturalidad.
- CE25 - Adquirir una visión amplia de las posibilidades de la RMN en la determinación de la estructura de proteínas.

### COMPETENCIAS TRANSVERSALES

No existen

### OBJETIVOS O RESULTADOS DE APRENDIZAJE (SEGÚN LA MEMORIA DE VERIFICACIÓN DEL TÍTULO)

- Conocer los aspectos teóricos fundamentales de la espectroscopia de RMN.
- Familiarizarse con la instrumentación moderna de RMN y los aspectos prácticos fundamentales de su utilización.
- Adquirir habilidades en el procesamiento e interpretación de espectros reales de RMN de péptidos y proteínas.
- Adquirir la capacidad de abordaje de la asignación de espectros de RMN 2D de péptidos sencillos.
- Aprender los pasos necesarios para la determinación de la estructura de una proteína a partir de los espectros de RMN.
- Familiarizarse en el uso de software de difusión libre para el análisis y asignación de espectros y para la determinación y visualización de estructuras de proteínas.

### BREVE DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS (SEGÚN LA MEMORIA DE VERIFICACIÓN DEL TÍTULO)

- Fundamentos de la espectroscopia de RMN. El fenómeno de la RMN.
- Desplazamientos químicos. Acoplamiento escalar y dipolar.
- La RMN de pulsos. Instrumentación y aspectos prácticos.
- Relajación. Efecto NOE. Intercambio químico.
- RMN bi-dimensional homonuclear y heteronuclear.
- RMN de aminoácidos y proteínas.
- Estrategias de asignación de espectros de <sup>1</sup>H-RMN de proteínas.
- Identificación de sistemas de espín. Asignación secuencial.
- Asignación de proteínas grandes mediante RMN heteronuclear multidimensional.
- Predicción de estructura secundaria de proteínas.
- Determinación de la estructura terciaria a partir de restricciones de RMN.



## TEMARIO DETALLADO DE LA ASIGNATURA

### TEMARIO TEÓRICO:

- Tema 1: Fundamentos de la espectroscopia de RMN.  
El fenómeno de la RMN.  
Desplazamientos químicos.  
Acoplamiento escalar y dipolar.  
La RMN de pulsos. Instrumentación y aspectos prácticos.  
Relajación en RMN. Efecto NOE. Intercambio químico.  
RMN bi-dimensional homonuclear y heteronuclear.  
RMN de aminoácidos y proteínas.
- Tema 2: Estrategias de asignación de espectros de  $^1\text{H}$ -RMN de proteínas.  
Identificación de sistemas de espín.  
Asignación secuencial.
- Tema 3: Estrategias de asignación de proteínas grandes mediante RMN heteronuclear multidimensional.  
Predicción de estructura secundaria de proteínas.
- Tema 4: Determinación de la estructura terciaria a partir de restricciones de RMN.

### TEMARIO PRÁCTICO:

- Seminario de demostración de procesamiento de espectros con software libre NMRPipe.
- Seminario tutorial de asignación de espectros de triple resonancia con software libre CCPNMR.
- Seminario tutorial de determinación de estructura con software libre ARIA.
  
- Ejercicio de asignación de espectros 2D de angiotensina II.
- Ejercicio de asignación de espectros 2D y 3D de ubiquitina.

### BIBLIOGRAFÍA

- “Nuclear Magnetic Resonance” P.J. Hore. Ed. Oxford Science Publications (1995).
- “Modern NMR Techniques for Chemistry Research”. Andrew E. Derome, Pergamon Press, Oxford (1987).
- “Fundamentals of Nuclear Magnetic Resonance”. J. W. Hennel & J. Klinowski. Longman Group UK Limited (1993).
- “NMR of macromolecules : a practical approach” Roberts, Gordon C. K. col., IRL Press, Oxford (1995)
- “NMR of proteins” G. M. Clore, A. M. Gronenborn, Macmillan Press (1993)
- “NMR of proteins and nucleic acids” Kurt Wüthrich, John Wiley and Sons, New York, (1986)
- “Biomolecular NMR spectroscopy” Jeremy N.S. Evans, Oxford University Press (1995).
- “Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy” Joseph B. Lambert & Eugene P. Mazzola. Ed. Pearson, Prentice Hall. N.Y. (2004).
- “Protein NMR spectroscopy: Principles and practice” John Cavanagh et al. Elsevier Science & Technology (2007).

### ENLACES RECOMENDADOS (OPCIONAL)

<http://posgrados.ugr.es>; <http://prado.ugr.es>

### METODOLOGÍA DOCENTE

La metodología docente se basará en dos métodos fundamentales:

- 1) Las clases presenciales consistirán en una serie de presentaciones por parte del profesor sobre cada tema a desarrollar. Estas presentaciones serán combinadas con discusiones orientadas por el profesor y seminarios de demostración utilizando ejemplos prácticos. Para ello se plantearán problemas concretos a resolver, que permitirán la introducción y explicación gradual de los conceptos necesarios, ejemplificándose con



la resolución parcial de los problemas plantados en la clase y discutiendo las posibles alternativas para su abordaje. Para el desarrollo de estas clases se utilizarán principalmente proyecciones de ordenador que facilitan la presentación y permitirán hacer ejemplos de simulaciones y cálculos mediante la utilización de software especializado.

2) El trabajo personal del alumno sobre los problemas concretos plantados, que podrá abordarse en equipo si el número de alumnos matriculados lo aconseja. Para ello, al inicio del curso se proporcionará al alumno las presentaciones de las lecciones en formato electrónico, los espectros, los programas de análisis y toda la información necesaria para la resolución de los problemas plantados y discutidos en las clases presenciales.

#### **EVALUACIÓN (INSTRUMENTOS DE EVALUACIÓN, CRITERIOS DE EVALUACIÓN Y PORCENTAJE SOBRE LA CALIFICACIÓN FINAL, ETC.)**

La evaluación será continua, con un seguimiento del esfuerzo del alumno y sus progresos a lo largo del curso. Los criterios evaluación se basarán en:

1) La valoración del interés del alumno que se refleja principalmente en la asistencia regular a las clases y en la participación activa en las discusiones que se desarrollan en las mismas (20%). Competencias evaluadas: CB8, CB10, CE1, CE4, CE6, CE9.

2) El progreso del alumno en los conocimientos impartidos, que podrá valorarse mediante tests y problemas que se van proponiendo a medida que se desarrolla el curso (20%). Competencias evaluadas: CB6, CB9, CE1, CE6, CE25.

3) La corrección y calidad de la resolución de los ejercicios y proyectos propuestos para trabajo personal del alumno. (60%): Competencias evaluadas: CB6, CB7, CB8, CB9, CB10, CE1, CE2, CE3, CE4, CE6, CE25.

Estos componentes en la evaluación se consideran suficientes dado que el número de alumnos se espera que sea reducido y permiten una valoración adecuada del grado de aprovechamiento del alumno de los conocimientos y además dan margen de maniobra para la reorientación del curso en caso de que la formación previa del alumno o el propio desarrollo del programa no se ajusten a los objetivos esperados.

#### **CONVOCATORIA EXTRAORDINARIA**

El artículo 19 de la Normativa de Evaluación y Calificación de los Estudiantes de la Universidad de Granada establece que los estudiantes que no hayan superado la asignatura en la convocatoria ordinaria dispondrán de una convocatoria extraordinaria. A ella podrán concurrir todos los estudiantes, con independencia de haber seguido o no un proceso de evaluación continua.

De esta forma, el estudiante que no haya realizado la evaluación continua tendrá la posibilidad de obtener el 100% de la calificación mediante la realización de una prueba teórica (50%) y un ejercicio práctico (50%).

#### **DESCRIPCIÓN DE LAS PRUEBAS QUE FORMARÁN PARTE DE LA EVALUACIÓN ÚNICA FINAL, ESTABLECIDA EN LA NORMATIVA DE EVALUACIÓN Y DE CALIFICACIÓN DE LOS ESTUDIANTES DE LA UNIVERSIDAD DE GRANADA**

El artículo 8 de la Normativa de Evaluación y Calificación de los Estudiantes de la Universidad de Granada establece que podrán acogerse a la evaluación única final, el estudiante que no pueda cumplir con el método de evaluación continua por causas justificadas.

Para acogerse a la evaluación única final, el estudiante, en las dos primeras semanas de impartición de la asignatura o en las dos semanas siguientes a su matriculación si ésta se ha producido con posterioridad al inicio de las clases o por causa sobrevenidas. Lo solicitará, a través del procedimiento electrónico, a la Coordinación del Máster, quien dará traslado al profesorado correspondiente, alegando y acreditando las razones que le asisten para no poder seguir el sistema de evaluación continua.

La evaluación en tal caso consistirá en una prueba teórica escrita (50%) y un ejercicio práctico (50%).

#### **ESCENARIO A (ENSEÑANZA-APRENDIZAJE PRESENCIAL Y NO PRESENCIAL)**



| ATENCIÓN TUTORIAL  |   |
|--|---|
| HORARIO<br>(Según lo establecido en el POD)  | HERRAMIENTAS PARA LA ATENCIÓN TUTORIAL<br>(Indicar medios telemáticos para la atención tutorial)  |
| <ul style="list-style-type: none"> <li>Lunes, miércoles y viernes, de 9 a 11 horas.</li> </ul>   | <ul style="list-style-type: none"> <li>Mensajería a través de PRADO</li> <li>Correo electrónico</li> <li>Foros de discusión en PRADO</li> <li>Videoconferencia por Google Meet o similar a petición del estudiante</li> </ul> |
| MEDIDAS DE ADAPTACIÓN DE LA METODOLOGÍA DOCENTE  |   |
| <ul style="list-style-type: none"> <li>Se priorizará la docencia presencial. No se espera un número elevado de estudiantes, por lo que es probable que se pueda acceder a un aula con capacidad suficiente para mantener las medidas higiénico-sanitarias recomendadas, por lo que no se espera tener que realizar ninguna modificación con respecto a la metodología docente presencial.</li> <li>En caso de no ser posible, se llevarán a cabo clases virtuales síncronas a través de la plataforma Google Meet o las que dicte la UGR en su momento, en las que se realizarán presentaciones de diapositivas comentadas por el profesor y discutidas con los alumnos, demostraciones de ejercicios mediante la utilización de software libre y discusión interactiva de problemas y ejercicios con los estudiantes. Las circunstancias sanitarias (enfermedad del profesor o familiar, conciliación familiar...) podrían imponer un escenario asíncrono a través Google drive y se complementarían con actuaciones de seguimiento y retorno formativo específicas para ese fin (tutorías, tareas, entregas...).</li> <li>Las plataformas descritas (Prado, Google Meet, Consigna UGR, Google Drive a través de cuenta @go.ugr.es, correo institucional...) son las actualmente autorizadas por la UGR. Podrían verse modificadas si las instrucciones de la UGR al respecto cambiasen durante el curso.</li> <li>Como medida adicional, se prestaría especial atención en facilitar material docente a los estudiantes a través de la plataforma Prado, Consigna UGR y/o Google Drive.</li> </ul> |   |
| MEDIDAS DE ADAPTACIÓN DE LA EVALUACIÓN (Instrumentos, criterios y porcentajes sobre la calificación final)   |   |
| <b>Convocatoria Ordinaria</b>  |   |
| <ul style="list-style-type: none"> <li>La evaluación será continua y se utilizarán los mismos elementos de evaluación que se describen para la docencia presencial.</li> </ul>   |   |
| <b>Convocatoria Extraordinaria</b>   |   |
| <ul style="list-style-type: none"> <li>El estudiante que no haya realizado la evaluación continua tendrá la posibilidad de obtener el 100% de la calificación mediante la realización de una prueba presencial consistente en una prueba teórica (50%) y un ejercicio práctico (50%).</li> </ul>   |   |
| <b>Evaluación Única Final</b>  |   |
| <ul style="list-style-type: none"> <li>No se esperan modificaciones con respecto al escenario presencial, por lo que la evaluación en tal caso consistirá en una prueba presencial consistente en una prueba teórica escrita (50%) y un ejercicio práctico (50%).</li> </ul>   |   |
| ESCENARIO B (SUSPENSIÓN DE LA ACTIVIDAD PRESENCIAL)  |   |
| ATENCIÓN TUTORIAL  |   |
| HORARIO  | HERRAMIENTAS PARA LA ATENCIÓN TUTORIAL  |



| (Según lo establecido en el POD)   | (Indicar medios telemáticos para la atención tutorial)  |
|--|---|
| <ul style="list-style-type: none"> <li>Lunes, miércoles y viernes, de 9 a 11 horas.</li> </ul>   | <ul style="list-style-type: none"> <li>Mensajería a través de PRADO</li> <li>Correo electrónico</li> <li>Foros de discusión en PRADO</li> <li>Videoconferencia por Google Meet o similar a petición del estudiante</li> </ul> |
| <b>MEDIDAS DE ADAPTACIÓN DE LA METODOLOGÍA DOCENTE</b>   |   |
| <p>Se llevarán a cabo clases virtuales a través de Google Meet en las que se realizarán presentaciones de diapositivas comentadas por el profesor y discutidas con los alumnos, demostraciones de ejercicios mediante la utilización de software libre y discusión interactiva de problemas y ejercicios con los estudiantes. Todo el material de clase se pondrá a disposición del estudiante a través de la plataforma PRADO.</p> <p>Se primará la impartición síncrona, aunque las circunstancias sanitarias (enfermedad del profesor o familiar, conciliación familiar...) podrían imponer un escenario asíncrono a través de Google drive y se complementarían con actuaciones de seguimiento y retorno formativo específicas para ese fin (tutorías, tareas, entregas...)</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Las plataformas descritas (Prado, Prado Examen, Google Meet, Google Drive a través de cuenta @go.ugr, correo institucional...) son las actualmente autorizadas por la UGR. Podrían verse modificadas si las instrucciones de la UGR al respecto cambiasen durante el curso.</li> <li>Como medida adicional, se prestaría especial atención en facilitar material docente a los estudiantes a través de la plataforma Prado, Consigna UGR y/o Google Drive.</li> </ul> |   |
| <b>MEDIDAS DE ADAPTACIÓN DE LA EVALUACIÓN (Instrumentos, criterios y porcentajes sobre la calificación final)</b>  |   |
| <b>Convocatoria Ordinaria</b>  |   |
| <ul style="list-style-type: none"> <li>La evaluación será continua y se utilizarán los mismos elementos de evaluación que se describen para la docencia presencial. Los ejercicios y trabajos a evaluar se presentarán a través de la plataforma PRADO.</li> </ul>   |   |
| <b>Convocatoria Extraordinaria</b>   |   |
| <ul style="list-style-type: none"> <li>El estudiante que no haya alcanzado las competencia mediante la evaluación continua tendrá la posibilidad de obtener el 100% de la calificación mediante la realización de una prueba consistente en una prueba teórica (50%) y un ejercicio práctico (50%). En este escenario la prueba se realizará online mediante Google Meet siguiendo las recomendaciones de identidad del estudiante recomendadas.</li> </ul>  |   |
| <b>Evaluación Única Final</b>  |   |
| <ul style="list-style-type: none"> <li>La evaluación única final consistirá en una prueba teórica escrita (50%) y un ejercicio práctico (50%). En este escenario la prueba se realizará online mediante Google Meet siguiendo las recomendaciones de identidad del estudiante recomendadas.</li> </ul>   |   |

