



UNIVERSIDAD  
DE GRANADA

## PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

GRADO EN QUÍMICA

CURSO 2023/2024



Facultad de Ciencias

### PROPUESTA DEL DEPARTAMENTO/EMPRESA

#### DATOS BÁSICOS DEL TFG

TÍTULO TFG	AlphaFold y la predicción de la estructura proteínica		
CÓDIGO TFG <sup>(1)</sup>	MA-23/24-01	TIPOLOGÍA <sup>(2)</sup>	C

<sup>(1)</sup> A rellenar por la dirección del dpto que vendrá dado como: código del dpto-Nº de orden (p.e.: QA-01)

<sup>(2)</sup> Al final del documento se encuentran las diferentes tipologías

OFERTADO POR	Profesor del Departamento	<input checked="" type="checkbox"/>
	Profesor del Departamento junto con Empresa o Institución	<input type="checkbox"/>

#### DATOS DE LA ENTIDAD (donde se va a realizar el TFG)

CENTRO (Departamento, institución o empresa)	Departamento de Matemática Aplicada		
DIRECCIÓN POSTAL <sup>(3)</sup>			
LOCALIDAD <sup>(3)</sup>		C.P. <sup>(3)</sup>	

<sup>(3)</sup> A rellenar en el caso de realizarse en una empresa

#### DATOS DEL TUTOR

TUTOR 1 (Tutor académico en caso de realizar el TFG en una empresa o institución)			
NOMBRE Y APELLIDOS	Juan Calvo Yagüe		
DEPARTAMENTO	Matemática Aplicada		
CARGO <sup>(4)</sup>	Profesor titular		
TELÉFONO	43192	E-MAIL	juancalvo@ugr.es

Rellenar en caso de haber un segundo tutor

TUTOR 2			
NOMBRE Y APELLIDOS			
DEPARTAMENTO			
CARGO <sup>(4)</sup>			
TELÉFONO		E-MAIL	
TUTOR DE LA EMPRESA O INSTITUCIÓN (Rellenar en caso de realizar el TFG en una empresa o institución)			
NOMBRE Y APELLIDOS			
TITULACIÓN			
TELÉFONO		E-MAIL	

<sup>(4)</sup> Catedrático, Profesor Titular, Profesor Contratado Doctor,....

## MEMORIA DE LA PROPUESTA DE TFG

<p><b>Introducción.</b></p> <p>La descripción de la estructura espacial de las proteínas es uno de los grandes retos de la Ciencia actual, con importantes implicaciones por ejemplo en Bioquímica (descripción del funcionamiento de sistemas biológicos a escala celular) y en el diseño de fármacos, por citar algunas de las más inmediatas. Hasta la fecha, no disponemos de una teoría que nos permita realizar predicciones fiables al respecto. Recientemente, este problema se ha abordado utilizando herramientas de machine learning. Algunos equipos proclaman que los algoritmos así diseñados representan un gran salto cualitativo en nuestra capacidad predictiva, cuyas consecuencias pronto serán patentes.</p>
<p><b>Objetivos.</b></p> <p>Hacer una revisión bibliográfica sobre el problema de la estructura de las proteínas y los avances realizados hasta la fecha.</p> <p>Describir el modus operandi de los algoritmos planteados en [1,2].</p> <p>Contextualizar la relevancia de los nuevos algoritmos predictivos desde una perspectiva química.</p>
<p><b>Resumen de los trabajos a realizar por el estudiante/Plan de trabajo.</b></p> <p>Revisión bibliográfica sobre el problema de la estructura de las proteínas. Contextualizar el problema y describir sus implicaciones (dificultad media).</p> <p>Estudio de los artículos [1,2] (dificultad media-alta).</p> <p>Análisis crítico de la situación actual.</p> <p>Bibliografía:</p> <p>[1] J. Jumper et al., Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold. Nature 596 (2021)</p> <p>[2] K. Tunyasuvunakool et al., Highly accurate protein structure prediction for the human proteome. Nature 596 (2021)</p>

---

**Una vez cumplimentado deberá ser enviado junto con el resto de las propuestas del departamento en formato pdf (Word transformado en pdf, NO escaneado) al correo: [gradoquimica@ugr.es](mailto:gradoquimica@ugr.es). El nombre de cada fichero debe de coincidir con el código del TFG.**

---

### TIPOLOGÍA<sup>(2)</sup>

- A.** Trabajos de investigación con orientación básica o aplicada, cuya temática se relacione con los contenidos de la titulación, como:
- A1.** Estudio de casos, teóricos o prácticos, relacionados con la temática del Grado, a partir de material ya disponible en los Centros.
  - A2.** Trabajos experimentales, de toma de datos de campo, de laboratorio, etc.
  - A3.** Elaboración de guías prácticas relacionadas con la temática del Grado.
- B.** Trabajos científico-técnicos representativos del ejercicio profesional para el que capacita la titulación, como:
- B1.** Elaboración de un informe o un proyecto de naturaleza profesional.
  - B2.** Elaboración de un plan de empresa.
  - B3.** Simulación de encargos profesionales.
- C.** Trabajos bibliográficos (**C**)