



UNIVERSIDAD
DE GRANADA



Facultad de Ciencias



Propuesta TFG_BIOTEC

Curso: 2017-18

DEPARTAMENTO:

BIOQUIMICA Y BIOLOGIA MOLECULAR I

CÓDIGO DEL TFG: BQ1-6

1. DATOS DEL TFG OFERTADO:

Título: Fundamentos teóricos del cálculo analítico de la superficie molecular en proteínas, y/o aproximación computacional

El conocimiento de la superficie molecular tiene importantes implicaciones en la descripción geométrica de las interacciones macromoleculares [1], restringiendo el espacio de búsqueda para los algoritmos de docking [2] y determinando los residuos que interactúan con el ligando fundamentales en los procesos de binding [3].

Se pueden distinguir fundamentalmente cuatro tipos de superficies moleculares: superficie de van der Waals, superficie accesible al disolvente, superficie de contacto y superficie molecular [4, 5]. Los algoritmos analíticos definen la superficie de forma continua, dando el valor final como el resultado de una ecuación o de un conjunto de ecuaciones. Estas ecuaciones pueden presentar cierta complejidad, así como casos particulares irresolubles, o donde la solución no es un número real [6, 7]. La superficie definida según estos parámetros puede entenderse como la suma de varios subconjuntos de superficies geométricas regulares: casquetes esféricos, toroides y triángulos geodésicos.

Para la realización de este trabajo fin de grado se propone la descripción analítica de estas superficies establecida a partir de los datos obtenidos en la bibliografía. Así como su aplicación directa sobre estructuras macromoleculares, mediante el uso de ficheros de estructura tipo PDB (*Protein Data Bank*). Para lo cual será necesario el desarrollo de algoritmos y su programación, que será implementada en el entorno *Lazarus*, basado en el lenguaje *Object Pascal* bajo licencia *GPL*, desarrollado a partir de Free Pascal. Para lo cual el candidato deberá poseer conocimientos básicos de programación (python, matlab, C+, ...) , y en aquellos aspectos de la biología molecular y geometría estructural de proteínas necesarios para la consecución del proyecto.

Tabla de actividades y dedicación estimada:

Planteamiento, orientación, supervisión, y preparación de la memoria	20
Preparación de la memoria	9
Desarrollo del trabajo	120
Exposición del trabajo	1
TOTAL (6 ECTS)	150 horas

OFERTADO POR:

Profesor del Departamento

Profesor del Departamento junto con Empresa o Institución

Propuesto por alumno (*)

(*) En el caso de TFG propuesto por alumno, por favor completar la siguiente información sobre el mismo:

Apellidos:

Nombre:

e-mail institucional:

2. MODALIDAD: 5

1. Estudio de casos, teóricos o prácticos, relacionados con la temática del Grado
2. Elaboración de un informe o un proyecto de naturaleza profesional
3. Elaboración de un plan de empresas
4. Simulación de encargos profesionales
5. Trabajos experimentales, de toma de datos.
6. Trabajos bibliográficos sobre el estado actual de una temática relacionada con el Grado.
7. Trabajos derivados de la experiencia desarrollada en prácticas externas.

3. COMPETENCIAS Y RESULTADOS DEL APRENDIZAJE:

CG2 - Capacidad para la modelización, simulación y optimización de procesos y productos biotecnológicos.

CG5 - Conocer los principios básicos de la estructura y funcionalidad de los sistemas biológicos.

CG8 - Diseñar nuevos productos a partir de la modificación de organismos y modelización de fenómenos biológicos.

CB2 - Que los estudiantes sepan aplicar sus conocimientos a su trabajo o vocación de una forma profesional y posean las competencias que suelen demostrarse por medio de la elaboración y defensa de argumentos y la resolución de problemas dentro de su área de estudio

CB3 - Que los estudiantes tengan la capacidad de reunir e interpretar datos relevantes (normalmente dentro de su área de estudio) para emitir juicios que incluyan una reflexión sobre temas relevantes de índole social, científica o ética

CB4 - Que los estudiantes puedan transmitir información, ideas, problemas y soluciones a un público tanto especializado como no especializado

CB5 - Que los estudiantes hayan desarrollado aquellas habilidades de aprendizaje necesarias para emprender estudios posteriores con un alto grado de autonomía

4. BIBLIOGRAFIA BÁSICA:

1. Tsujikawa, H., et al., *Development of a protein-ligand-binding site prediction method based on interaction energy and sequence conservation*. J Struct Funct Genomics, 2016. **17**(2-3): p. 39-49.
2. Joy, S., et al., *Detailed comparison of the protein-ligand docking efficiencies of GOLD, a commercial package and ArgusLab, a licensable freeware*. In Silico Biol, 2006. **6**(6): p. 601-5.
3. Hernandez, M., D. Ghersi, and R. Sanchez, *SITEHOUND-web: a server for ligand binding site identification in protein structures*. Nucleic Acids Res, 2009. **37**(Web Server issue): p. W413-6.
4. Lee, B. and F.M. Richards, *The interpretation of protein structures: estimation of static accessibility*. J Mol Biol, 1971. **55**(3): p. 379-400.
5. Quan, C. and B. Stamm, *Meshing molecular surfaces based on analytical implicit representation*. J Mol Graph Model, 2017. **71**: p. 200-210.
6. Quan, C. and B. Stamm, *Mathematical analysis and calculation of molecular surfaces*. Journal of Computational Physics, 2016. **322**: p. 760-782.
7. Connolly, M.L., *Analytical Molecular-Surface Calculation*. Journal of Applied Crystallography, 1983. **16**(Oct): p. 548-558.

5. ACLARACIONES PARA EL ESTUDIANTE:

Para la realización de este proyecto es altamente recomendable que el alumno o alumna curse o haya cursado la asignatura de Ingeniería de Proteínas. En ella se completan los conocimientos básicos y las destrezas necesarias para desarrollar herramientas elementales de bio-informática estructural de proteínas.

3. DATOS DEL TUTOR/A UGR:

Apellidos: Reyes Zurita
Teléfono: 958 24 32 52

Nombre: Fernando J.
e-mail: ferjes@ugr.es

**En el caso de trabajos desarrollados en Empresas u otras Instituciones ajenas a la Universidad de Granada, por favor completar la siguiente información:

TUTOR/A DE LA EMPRESA O INSTITUCIÓN:

Apellidos:
Empresa/Institución:
Teléfono:

Nombre:
e-mail: