



UNIVERSIDAD
DE GRANADA



Facultad de Ciencias



BIOTECNOLOGÍA
UGR

Propuesta TFG_BIOTEC
Curso: 2023-24
DEPARTAMENTO: QUÍMICA FÍSICA

CÓDIGO DEL TFG: QUIFI-1

1. DATOS DEL TFG OFERTADO:

Título: Estudio de las bases moleculares del alosterismo. Análisis del papel de los restos aromáticos en las redes cooperativas intramoleculares.

Resumen (máx 250 palabras, estructurado en Introducción, Objetivos y Plan de trabajo):

El trabajo se enmarca en una línea de investigación cuyo objetivo general es el desarrollo de inhibidores alostéricos de proteínas de interés como dianas para el desarrollo de nuevos antivirales de amplio espectro y fármacos antimetastásicos.

Objetivos:

1. Generar una base de datos estructural con proteínas alostéricas y no alostéricas de interés como dianas para el desarrollo de antivirales y antitumorales.
2. Diseñar una estrategia de cálculo robusta para identificar redes intramoleculares de comunicación cooperativa utilizando herramientas computacionales de acceso abierto.
3. Aplicar dicha estrategia al análisis de la base de datos de proteínas generada con el fin de analizar el papel de los aminoácidos aromáticos en la transmisión de información a través de la estructura.

Plan de trabajo:

- Objetivo 1:
 - o Realizar búsqueda bibliográfica y filtrado de bases de datos estructurales para identificar dianas estructural y funcionalmente diversas y relevantes para el desarrollo de antivirales y antitumorales con y sin comportamiento alostérico conocido para las que se disponga de estructura tridimensional de alta resolución en presencia y ausencia de ligandos e inhibidores.
 - o Filtrado, limpieza y formateado de los ficheros estructurales para la aplicación de las distintas herramientas computacionales.
- Objetivo 2:
 - o Búsqueda bibliográfica sobre herramientas computacionales para la predicción de alosterismo, sitios alostéricos y mecanismos de comunicación intramolecular.
 - o Selección de herramientas y diseño del procedimiento de cálculo y análisis posterior.
- Objetivo 3:
 - o Aplicación de los distintos algoritmos a las proteínas seleccionadas
 - o Realización de un consenso entre los resultados obtenidos
 - o Análisis del papel de los distintos tipos de aminoácidos en la comunicación intramolecular en proteínas alostéricas y no alostéricas.

Planteamiento, orientación, supervisión, y
preparación de la memoria

20

Tabla de actividades y dedicación
estimada:

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:

1. Estudio de casos, teóricos o prácticos, bibliográficos 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 derivados de la experiencia desarrollada en prácticas externas.

3. COMPETENCIAS Y RESULTADOS DEL APRENDIZAJE:

CT1.- Capacidad de análisis y síntesis

CT2.- Capacidad de organizar y planificar

CT3.- Capacidad de aplicar los conocimientos en la práctica y de resolver problemas

CT4.- Capacidad de comunicar de forma oral y escrita en las lenguas del Grado

CT5.- Razonamiento crítico

CT8.- Capacidad para la toma de decisiones

CT9.- Capacidad de trabajar en equipo y en entornos multidisciplinares.

CE2.- Poseer habilidades matemáticas, estadísticas e informáticas para obtener, analizar e interpretar datos y para entender modelos sencillos.

CE4.- Saber buscar, obtener e interpretar la información de las principales bases de datos biológicos (genómicos, transcriptómicos, proteómicos, metabolómicos y similares, derivados de otros análisis masivos) y de datos bibliográficos, y usar herramientas bioinformáticas básicas.

CE5.- Ser capaz de diseñar modelos simples para la experimentación en un problema biotecnológico y extraer resultados de los datos obtenidos.

4. BIBLIOGRAFIA BÁSICA:

- 1.- Amammuddy, O.S., et al. "Integrated Computational Approaches and Tools for Allosteric Drug Discovery.", 2020, Intern. J. Mol. Sci., 21, 847; doi:10.3390/ijms21030847
- 2.- Fan, J. et al. "Harnessing Reversed Allosteric Communication: A Novel Strategy for Allosteric Drug Discovery", 2021, J. Med. Chem., 64, 17728-17743
- 3.- Gopi, S., et al. "pPerturb: A server for Predicting Long-Distance Energetic Couplings and Mutation-Induced Stability Changes in Proteins via Perturbations" 2020, ACS Omega, 5, 1142-1146.
- 4.- Wang, J. et al. "Mapping allosteric communications within individual proteins", Nature Communications, 11:3862.

5. ACLARACIONES PARA EL ESTUDIANTE:

Se requiere:

Conocimientos de inglés a nivel B2 para la lectura y comprensión de artículos relacionados con la temática del trabajo

Conocimientos de estructura de proteínas, manejo de programas de visualización y análisis de proteínas.

Es recomendable:

Conocimientos básicos de programación (R o Python)

3. DATOS DEL TUTOR/A UGR:

Apellidos: Luque Fernández

Teléfono: 665369389

Nombre: Irene

e-mail: iluque@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: