



UNIVERSIDAD
POLITÉCNICA
DE MADRID

PROCESO DE
COORDINACIÓN DE LAS
ENSEÑANZAS PR/CL/001



Etsi Agronómica, Aliment. y
Biosistemas

ANX-PR/CL/001-01

GUÍA DE APRENDIZAJE

ASIGNATURA

20504411 - Estructura E Ingeniería De Proteínas

PLAN DE ESTUDIOS

20BT - Grado En Biotecnología

CURSO ACADÉMICO Y SEMESTRE

2025/26 - Primer semestre

Índice

Guía de Aprendizaje

1. Datos descriptivos.....	1
2. Profesorado.....	1
3. Conocimientos previos recomendados.....	2
4. Competencias y resultados de aprendizaje.....	2
5. Descripción de la asignatura y temario.....	3
6. Cronograma.....	6
7. Actividades y criterios de evaluación.....	8
8. Recursos didácticos.....	12
9. Otra información.....	14

1. Datos descriptivos

1.1. Datos de la asignatura

Nombre de la asignatura	20504411 - Estructura e Ingeniería de Proteínas
No de créditos	5 ECTS
Carácter	Obligatoria
Curso	Cuarto curso
Semestre	Séptimo semestre
Período de impartición	Septiembre-Enero
Idioma de impartición	Inglés/Castellano
Titulación	20BT - Grado en Biotecnología
Centro responsable de la titulación	20 - Etsi Agronómica, Aliment. Y Biosistemas
Curso académico	2025-26

2. Profesorado

2.1. Profesorado implicado en la docencia

Nombre	Despacho	Correo electrónico	Horario de tutorías *
Krzysztof Teodor Wabnik		k.wabnik@upm.es	Sin horario. Solicitar vía email
Maria Garrido Arandia (Coordinador/a)		maria.garrido@upm.es	Sin horario. Solicitar vía email
Manuel Gonzalez Guerrero		manuel.gonzalez@upm.es	Sin horario. solicitar vía email

* Las horas de tutoría son orientativas y pueden sufrir modificaciones. Se deberá confirmar los horarios de tutorías con el profesorado.

3. Conocimientos previos recomendados

3.1. Asignaturas previas que se recomienda haber cursado

- Bioquímica Estructural

3.2. Otros conocimientos previos recomendados para cursar la asignatura

El plan de estudios Grado en Biotecnología no tiene definidos otros conocimientos previos para esta asignatura.

4. Competencias y resultados de aprendizaje

4.1. Competencias

CB01 - Que los estudiantes hayan demostrado poseer y comprender conocimientos en un área de estudio que parte de la base de la educación secundaria general, y se suele encontrar a un nivel que, si bien se apoya en libros de texto avanzados, incluye también algunos aspectos que implican conocimientos procedentes de la vanguardia de su campo de estudio

CB02 - 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

CB04 - Que los estudiantes puedan transmitir información, ideas, problemas y soluciones a un público tanto especializado como no especializado

CE17 - Conocimientos adecuados de la estructura de las distintas macromoléculas biológicas y distinguir su función y los procedimientos para su separación.

CE20 - Habilidad para utilizar aplicaciones informáticas que permitan analizar y visualizar estructuras de ácidos nucleicos, proteínas y macromoléculas.

CG01 - Ser capaz de evaluar y discernir los diferentes mecanismos moleculares y celulares responsables de las transformaciones que llevan a cabo los seres vivos, así como poder desarrollar soluciones alternativas y novedosas frente a problemas biológicos conocidos y/o emergentes.

CG04 - Adquirir la formación y habilidades para el desarrollo de la investigación biotecnológica (tecnologías y estrategias frontera), de cara a su posterior aplicación.

CT02 - Aplicar el método científico para la resolución de problemas de forma efectiva y creativa.

4.2. Resultados del aprendizaje

RA237 - Examinar *in silico* los efectos estructurales de cambios en proteínas

RA238 - Conocer los principales métodos para la obtención experimental de estructuras de proteínas

RA235 - Conocer y manejar software adecuado para el análisis de la estructura y función de biomoléculas

RA236 - Conocer las bases estructurales de las interacciones moleculares en sistemas proteína-ligando y proteína-proteína

RA239 - Conocer los principales métodos para modelar computacionalmente estructuras de proteínas

5. Descripción de la asignatura y temario

5.1. Descripción de la asignatura

La asignatura presenta de forma rigurosamente actualizada el **estado y la naturaleza de los estudios *in silico* en proteínas** como complemento metodológico a los estudios experimentales (*in vitro* e *in vivo*). En la asignatura se trata la estructura de proteínas como fundamento para la elaboración de hipótesis sobre función e interacciones biológicas, diseño racional por ordenador de experimentos y construcción de modelos estructurales y funcionales de sistemas proteína-proteína y proteína-ligando. La metodología empleada en la asignatura es **totalmente computacional** de modo que al finalizarla, el alumno está en condiciones de emplear múltiples recursos informáticos (bases de datos y servidores web así como software genérico y específico sobre estructura y función de proteínas) que representarán un valioso complemento a la formación experimental que ha recibido en diversas asignaturas del Grado en Biotecnología.

The course presents an up-to-date overview of the state and nature of *in silico* studies methodological complement to experimental studies (*in vitro* and *in vivo*). The course covers protein structure as a foundation for developing hypotheses about function and biological interactions, computer-aided rational design of experiments, and the construction of structural and functional models of protein-protein and protein-ligand systems. The methodology employed in the course is entirely computational, so by the end of the course, students will be able to utilize multiple computational resources (databases and web servers, as well as generic and specific software related to protein structure and function) that will serve as a valuable complement to the experimental training they have received in various subjects within the Biotechnology Degree program.

5.2. Temario de la asignatura

1. Estructura molecular e interacciones intermoleculares
 - 1.1. Geometría molecular y superficies moleculares
 - 1.2. Densidad electrónica y estructura molecular
 - 1.3. Vibración, torsión y conformación
 - 1.4. Elementos y operaciones de simetría
 - 1.5. Interacciones intermoleculares
 - 1.6. Aminoácidos: tipos y propiedades
 - 1.7. Escalas de aminoácidos en proteínas
2. Estructura de proteínas
 - 2.1. Plano peptídico, diedros y rotámeros
 - 2.2. Estructura secundaria
 - 2.3. Identificación y predicción de estructura secundaria
 - 2.4. Estructura terciaria, arquitectura y topología de proteínas
 - 2.5. Clasificación estructural
 - 2.6. Estructura cuaternaria, simetría e interfaces proteína-proteína
3. Determinación experimental de estructuras de proteínas
 - 3.1. Cristalografía de rayos X
 - 3.2. Espectroscopía RMN
 - 3.3. Microscopía crioelectrónica
 - 3.4. Protein Data Bank
4. Análisis de estructuras de proteínas

- 4.1. Archivos PDB
- 4.2. Superficies de proteínas
- 4.3. Electrostática en proteínas
- 4.4. Comparación de estructuras
- 5. Predicción de estructura y función
 - 5.1. Plegamiento y generación de estructura
 - 5.2. Cálculos de energías en proteínas
 - 5.3. Optimización de estructuras
 - 5.4. Predicción de estructura de proteínas
 - 5.5. Predicción de función de proteínas
- 6. Diseño e ingeniería de proteínas. Proteínas sin estructura única
 - 6.1. Diseño e ingeniería de proteínas por ordenador
 - 6.2. Mutaciones in silico
 - 6.3. Ingeniería con proteínas andamio
 - 6.4. Análisis de aplicaciones de diseño e ingeniería de proteínas
 - 6.5. Proteínas intrínsecamente desordenadas

6. Cronograma

6.1. Cronograma de la asignatura *

Sem	Actividad tipo 1	Actividad tipo 2	Tele-enseñanza	Actividades de evaluación
1	Tema 1 Duración: 04:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral			
2	Tema 1 Duración: 04:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral			
3	Tema 1 Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral Tema 2 Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral			
4	Tema 2 Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral	Prácticas ordenador Duración: 02:00 OT: Otras actividades formativas / Evaluación		
5	Tema 2 Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral	Prácticas Ordenador Duración: 02:00 OT: Otras actividades formativas / Evaluación		
6	Tema 3 Duración: 04:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral			
7	Tema 3 Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral	Prácticas Ordenador Duración: 02:00 OT: Otras actividades formativas / Evaluación		
8	Prueba de Evaluación Progresiva Duración: 02:00 OT: Otras actividades formativas / Evaluación			Primera prueba de evaluación progresiva EX: Técnica del tipo Examen Escrito Evaluación Progresiva Presencial Duración: 02:00
9	Tema 4 Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral	Prácticas ordenador Duración: 02:00 OT: Otras actividades formativas / Evaluación		
10	Tema 4 Duración: 04:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral			
11	Tema 5 Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral	Prácticas ordenador Duración: 02:00 OT: Otras actividades formativas / Evaluación		

12	Tema 5 Duración: 04:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral			
13	Tema 5 Duración: 02:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral	Prácticas ordenador Duración: 02:00 OT: Otras actividades formativas / Evaluación		
14	Tema 6 Duración: 04:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral			
15	Tema 6 Duración: 04:00 LM: Actividad del tipo Lección Magistral			
16				
17				<p>Segunda prueba de evaluación progresiva: Trabajo de ordenador EP: Técnica del tipo Examen de Prácticas Evaluación Progresiva No presencial Duración: 02:00</p> <p>Segunda prueba de evaluación progresiva EX: Técnica del tipo Examen Escrito Evaluación Progresiva Presencial Duración: 02:00</p> <p>Prueba de evaluación global para quienes no hayan superado la asignatura mediante las pruebas de evaluación progresiva. EX: Técnica del tipo Examen Escrito Evaluación Global Presencial Duración: 02:00</p>

Para el cálculo de los valores totales, se estima que por cada crédito ECTS el alumno dedicará dependiendo del plan de estudios, entre 26 y 27 horas de trabajo presencial y no presencial.

7. Actividades y criterios de evaluación

7.1. Actividades de evaluación de la asignatura

7.1.1. Evaluación (progresiva)

Sem.	Descripción	Modalidad	Tipo	Duración	Peso en la nota	Nota mínima	Competencias evaluadas
8	Primera prueba de evaluación progresiva	EX: Técnica del tipo Examen Escrito	Presencial	02:00	45%	5 / 10	CB01 CB02 CB04 CG04 CG01 CT02 CE20 CE17
17	Segunda prueba de evaluación progresiva: Trabajo de ordenador	EP: Técnica del tipo Examen de Prácticas	No Presencial	02:00	10%	5 / 10	CB01 CB02 CT02 CE20 CE17
17	Segunda prueba de evaluación progresiva	EX: Técnica del tipo Examen Escrito	Presencial	02:00	45%	5 / 10	CB01 CB02 CB04 CG04 CG01 CT02 CE20 CE17

7.1.2. Prueba evaluación global

Sem	Descripción	Modalidad	Tipo	Duración	Peso en la nota	Nota mínima	Competencias evaluadas
17	Prueba de evaluación global para quienes no hayan superado la asignatura mediante las pruebas de evaluación progresiva.	EX: Técnica del tipo Examen Escrito	Presencial	02:00	100%	5 / 10	CB01 CB02 CB04 CG04 CG01 CT02 CE20 CE17

7.1.3. Evaluación convocatoria extraordinaria

Descripción	Modalidad	Tipo	Duración	Peso en la nota	Nota mínima	Competencias evaluadas
Prueba de evaluación global para quienes no hayan superado las pruebas de evaluación progresiva en la convocatorias ordinaria	EX: Técnica del tipo Examen Escrito	Presencial	02:00	100%	5 / 10	CB01 CB02 CB04 CG04 CG01 CT02 CE20 CE17

7.2. Criterios de evaluación

Sistema de evaluación progresiva de la asignatura

Las pruebas de evaluación progresiva consisten en la realización de un **primer examen parcial** que cubrirá los temas 1-3. Quienes obtengan al menos un 5 sobre 10 en ese parcial, se examinarán en la segunda prueba de evaluación progresiva en enero sólo de la segunda parte de la asignatura correspondiente a los temas 4-6. Aquello que obtengan una nota inferior a 5 se les evaluará en la segunda prueba de evaluación progresiva de toda la materia. Ambas pruebas tendrán una parte de preguntas cortas sobre cuestiones específicas concretas y una parte de desarrollo de conceptos y modelos sobre los contenidos presentados en las clases de teoría y los métodos por ordenador utilizados en las clases prácticas. Estas pruebas de evaluación progresiva constituirán **el 90% de la nota final**

Este sistema de evaluación progresiva incluye la **realización de las prácticas** por ordenador en sesiones cuyas fechas se comunicarán con al menos 2 semanas de antelación. En la evaluación progresiva de la asignatura, los dos exámenes parciales se complementarán con la **evaluación individual de un trabajo de ordenador** que cada alumno entregará al final del curso con una fecha límite y según una propuesta que se publicarán en Moodle antes del mes de diciembre. Esa propuesta planteará unas tareas de investigación relacionadas con las actividades realizadas en las sesiones de prácticas en clase. En este trabajo se evaluará la destreza del estudiante en la resolución de las tareas propuestas, creatividad y grado de iniciativa, capacidad de síntesis y calidad de la

presentación, y la nota obtenida en su corrección se comunicará junto con las calificaciones finales de la convocatoria ordinaria. Esta prueba de evaluación progresiva constituirá un **10% de la nota final**.

La nota final de la asignatura por el sistema de evaluación progresiva se calculará por tanto como: **0.90*(nota media de los dos exámenes parciales) + 0.10*(nota del trabajo de ordenador)**. Cada prueba se calificarán sobre un total de 10 puntos.

Se podrá elegir voluntariamente no realizar el trabajo de ordenador, renunciando así al 10% de la nota final en cuyo caso la nota máxima de la asignatura será un 9.

Evaluación mediante prueba global

Quienes no hayan superado la asignatura mediante las pruebas de evaluación progresiva, tendrán que hacer una única prueba de evaluación global en forma de examen final escrito. Este examen cubrirá el temario completo (temas 1-6), pero no lo tratado en las prácticas por ordenador realizadas en el sistema de evaluación progresiva. Para superar la asignatura mediante esta prueba global, el **100% de la nota será la obtenida en este examen final** que habrá de ser al menos 5 sobre 10.

Progressive Assessment

The progressive assessment consist of a first partial exam covering topics 1-3. Those who score at least 5 out of 10 on this partial exam will take the second progressive assessment test in January, covering only the second part of the course corresponding to topics 4-6. Those who score below 5 will be assessed in the second progressive assessment test on the entire material. Both tests will include a section of short questions on specific issues and a section for developing concepts and models based on the theoretical content presented in the lectures and the computer methods used in practical classes. These progressive assessment tests will constitute 90% of the final grade.

This progressive assessment system includes completing computer practicals in sessions whose dates will be communicated at least 2 weeks in advance. In the progressive assessment of the course, the two partial exams will be complemented by the individual assessment of a computer assignment that each student will submit at the end of the course by a deadline, according to a proposal that will be published on Moodle before December. This proposal will outline research tasks related to the activities carried out in the practical sessions in class. This assignment will evaluate the student's skill in solving the proposed tasks, creativity and initiative, synthesis ability, and presentation quality. The grade obtained in this correction will be communicated along with the final grades of the ordinary call. This progressive assessment test will constitute 10% of the final grade.

Therefore, the final grade of the course under the progressive assessment system will be calculated as: $0.90 \times (\text{average grade of the two partial exams}) + 0.10 \times (\text{grade of the computer assignment})$. Each test will be graded out of a total of 10 points.

Students may voluntarily choose not to complete the computer assignment, thus forgoing the 10% of the final grade, in which case the maximum grade for the course will be 9.

Global Assesment

Those who have not passed the course through the progressive assessment tests will have to take a single comprehensive assessment test in the form of a final written exam. This exam will cover the entire syllabus (topics 1-6) but will not include the content covered in the computer practicals conducted under the progressive assessment system. To pass the course through this comprehensive exam, 100% of the grade will be based on this final exam, which must be at least 5 out of 10.

8. Recursos didácticos

8.1. Recursos didácticos de la asignatura

Nombre	Tipo	Observaciones
Branden C, Tooze J, 1999, Introduction to Protein Structure (2nd ed.), Garland Publishing	Bibliografía	
Gu J, Bourne PE, 2009, Structural Bioinformatics, Wiley-Blackwell	Bibliografía	
Lesk, A., 2016, Introduction to Protein Science. Architecture, Function, and Genomics, 3rd Edition, Oxford University Press	Bibliografía	
Nussinov R, Schreiber G, 2009, Computational Protein-Protein Interactions, CRC Press	Bibliografía	
Park SJ, Cochran JR, 2010, Protein Engineering and Design, CRC Press	Bibliografía	
Petsko A, Ringe D, 2004, Protein Structure and Function. Primers in Biology, New Science Press	Bibliografía	
Schwede T, Peitsch M, 2008, Computational Structural Biology. Methods and Applications, World Scientific Publishing Co.	Bibliografía	
Tramontano A, 2006, Protein Structure Prediction, Wiley-VCH	Bibliografía	
Uversky VN, 2014, Intrinsically Disordered Proteins (Springer Briefs in Molecular Science / Protein Folding and Structure), Springer	Bibliografía	

SwissModel (http://swissmodel.expasy.org)	Recursos web	Modelado por homología
PDB (http://www.pdb.org)	Recursos web	Base de datos centralizada de estructuras experimentales de proteínas
Chimera 1.15 (http://www.cgl.ucsf.edu/chimera/index.html)	Otros	Software usado en las prácticas de la asignatura
PDBSum (http://www.ebi.ac.uk/pdbsum)	Recursos web	Compendio de información estructuras sobre proteínas
Rhodes, Gale, 2006, Crystallography Made Crystal Clear. A Guide for Users of Macromolecular Models, 3rd. Edition, Academic Press-Elsevier	Bibliografía	
ProFunc (https://www.ebi.ac.uk/thornton-srv/databases/profunc/)	Recursos web	Predicción de función a partir de estructura y secuencia
PSIPRED (http://bioinf.cs.ucl.ac.uk/psipred/)	Recursos web	Predicción de estructura secundaria
JPred(http://www.compbio.dundee.ac.uk/jpred/)	Recursos web	Predicción de estructura secundaria
CUPSAT (http://cupsat.tu-bs.de/)	Recursos web	Predicción del efecto de mutaciones sobre la estabilidad estructural

9. Otra información

9.1. Otra información sobre la asignatura

La Comisión de Calidad del Centro en su reunión de 29 de mayo de 2023 acordó aprobar la propuesta de reasignación de competencias transversales en las asignaturas de los Grados en Biotecnología, Ingeniería Alimentaria, Ingeniería Agrícola, Ingeniería Agroambiental, Ciencias Agrarias y Bioeconomía, y en el Máster Universitario en Ingeniería Agronómica. En virtud de dicho acuerdo esta asignatura ha sido designada como ?Asignatura NO

Punto Control*?. Esto significa que si bien puede seguir trabajando una o varias competencias transversales que se abordan en distintos puntos y aspectos de la asignatura, dicha formación y evaluación no será objeto de recopilación de evidencias por los sistemas de acreditación de la calidad del Centro.

Los alumnos podrán descargarse de la página de la asignatura en Moodle las seis presentaciones PowerPoint con la práctica totalidad del material de las clases teóricas de los seis temas que componen el temario. En Moodle estará igualmente disponible material variado que se empleará a lo largo del curso: archivos de estructuras de proteínas, output de programas que se analizará en clase y documentos-guía preparados por el profesor, vídeos con animaciones de estructuras e interacciones moleculares en proteínas.

Antes del mes de diciembre, se subirá a Moodle una guía para la realización del trabajo de ordenador final, con indicación expresa de las tareas propuestas.

La asignatura se relaciona con el ODS4 y el ODS9.