

**Simulació Biomolecular****2014/2015**

Codi: 102517

Crèdits: 6

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
2502444 Química	OT	4	0

**Professor de contacte**

Nom: Àngels González Lafont

Correu electrònic: Angels.Gonzalez@uab.cat

**Utilització de llengües**

Llengua vehicular majoritària: català (cat)

Grup íntegre en anglès: No

Grup íntegre en català: Sí

Grup íntegre en espanyol: No

**Equip docent**

Jean Didier Pie Marechal

**Prerequisits**

Termodinàmica Química

Química Quàntica

Química Física

**Objectius**

L'objectiu d'aquesta assignatura és introduir als alumnes en els principis de la simulació biomolecular que permet visualitzar a nivell atòmic com es desenvolupen els processos biològics. La simulació biomolecular es basa en un procés de modelització molecular del sistema biològic que implica una sèrie d'etapes que es treballaran en aquest curs tant a nivell teòric com pràctic: 1) Càlcul de l'energia del sistema donada una determinada disposició dels seus àtoms i molècules mitjançant mètodes de la Mecànica Molecular i la Mecànica Quàntica; 2) Estudi de les tècniques computacionals que permeten determinar com l'energia del sistema varia en funció de les seves coordenades: a) Tècniques de minimització de l'energia; b) Tècniques de Dinàmica Molecular; c) Mètodes de càlcul de l'energia lliure; d) Tècniques de docking molecular; 3) Aplicacions al disseny de fàrmacs i a l'estudi de la catàlisi enzimàtica.

**Competències**

- Adaptar-se a noves situacions.
- Aprendre de manera autònoma.
- Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.
- Demostrar iniciativa i esperit emprenedor.
- Demostrar que es comprenen els conceptes, els principis, les teories i els fets fonamentals de les diferents àrees de la química.
- Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
- Gestionar, analitzar i sintetitzar informació.

- Interpretar les dades obtingudes mitjançant mesures experimentals, incloent-hi l'ús d'eines informàtiques; identificar-ne el significat i relacionar les dades amb les teories químiques, físiques o biològiques apropiades.
- Mostrar sensibilitat en qüestions mediambientals.
- Obtenir informació, incloent-hi la utilització de mitjans telemàtics.
- Proposar idees i solucions creatives.
- Raonar de forma crítica.
- Reconèixer i analitzar problemes químics i plantejar respostes o treballs adequats per a resoldre'ls.
- Resoldre problemes i prendre decisions.
- Treballar en equip i cuidar les relacions interpersonals de treball.
- Utilitzar la informàtica per al tractament i presentació d'informació.

## Resultats d'aprenentatge

1. Adaptar-se a noves situacions.
2. Analitzar trajectòries de dinàmica molecular.
3. Aprendre de manera autònoma.
4. Comunicar-se oralment i per escrit en la llengua pròpia.
5. Demostrar iniciativa i esperit emprenedor.
6. Determinar els canvis estructurals i energètics associats a un camí de reacció química.
7. Distingir entre els mètodes computacionals aplicats a les biomolècules.
8. Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
9. Gestionar, analitzar i sintetitzar informació.
10. Manejar a nivell bàsic la simulació per ordinador.
11. Manejar la metodologia bàsica de la química quàntica i la mecànica molecular.
12. Mostrar sensibilitat en qüestions mediambientals.
13. Obtenir informació, incloent-hi la utilització de mitjans telemàtics.
14. Plantejar simulacions en fase condensada.
15. Produir simulacions d'interaccions proteïna-ligand.
16. Proposar idees i solucions creatives.
17. Raonar de forma crítica.
18. Reconèixer les bases dels sistemes operatius i del llenguatge informàtics.
19. Resoldre problemes i prendre decisions.
20. Treballar en equip i cuidar les relacions interpersonals de treball.
21. Utilitzar la informàtica per al tractament i presentació d'informació.
22. Visualitzar biomolècules i certes propietats estructurals per mitjà de programes de visualització.

## Continguts

### Bloc I. QUÍMICA COMPUTACIONAL

1. Introducció a la modelització molecular.
2. Mecànica Molecular.
3. Teoria d'Orbitals Moleculares.
4. Mètodes post-Hartree-Fock.
5. Mètodes del funcional de la densitat.
6. Mètodes híbrids.
7. Modelització del dissolvent.

### Bloc II. SIMULACIÓ BIOMOLECULAR

1. Introducció: Biomolècules i simulacions.
2. Mètodes de simulació: Dinàmica Molecular.
3. Càlculs de diferències d'energia lliure.
4. Interacció proteïna-ligand i proteïna-proteïna.
5. Catàlisi enzimàtica: mecanismes i velocitat de reacció.

## Metodologia

### METODOLOGIA

L'assignatura SIMULACIÓ BIOMOLECULAR és una optativa de 6 ECTS pertanyent a la menció de QUÍMICA BIOLÒGICA.

La metodologia docent de l'assignatura consisteix en classes teòriques a l'aula i classes pràctiques a l'aula d'informàtica dirigides pels professors responsables de l'assignatura. Les classes teòriques i pràctiques es completaran amb hores de tutoria supervisades pels professors a fi de resoldre dubtes. L'alumne haurà de treballar de forma autònoma sobre els continguts teòrics i les qüestions/problemes plantejats pels professors a les sessions presencials i en la realització dels treballs de l'assignatura que comportaran una part de recerca bibliogràfica.

### Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Tipus: Dirigides			
Classes Teòriques	35	1,4	2, 6, 7, 10, 11, 14, 15, 18, 22
Classes pràctiques	16	0,64	2, 7, 8, 9, 10, 11, 14, 15, 17, 18, 19, 21, 22
Tipus: Supervisades			
Tutories	5	0,2	8, 9
Tipus: Autònomes			
Estudi	50	2	1, 2, 3, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 13, 14, 15, 17, 18, 19
Realització de treballs	10	0,4	1, 3, 4, 5, 8, 9, 12, 13, 16, 17, 19, 20, 21
Recerca bibliogràfica	5	0,2	9, 13
Resolució de qüestions/problemes	20	0,8	2, 3, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 14, 15, 17, 18, 19, 22

## Avaluació

### AVALUACIÓ

L'avaluació d'aquesta assignatura es farà amb avaluació continuada. No hi ha exàmens parcials ni examen de recuperació. Les proves escrites es faran *on line* o a l'aula utilitzant *quizzes* i problemes. Es completarà l'avaluació de l'assignatura mitjançant la correcció d'un treball.

Nota Global = 70% \* Nota *Quizzes/Problemes* + 30% \* Nota treball

A fi de rebre la qualificació global es permetrà (per causes justificades) que no s'hagi realitzat una de les activitats d'avaluació (*quizzes/problemes*).

Si l'alumne només ha estat avaluat com a màxim d'un 25% de les proves i abandona, la qualificació final serà de no presentat.

### Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Lliurament/Presentació treball	30	3	0,12	1, 4, 5, 6, 8, 9, 12, 14, 17, 19, 20, 21
Quizzes/problemes	70	6	0,24	1, 2, 7, 9, 10, 11, 15, 17, 18, 19, 21

### Bibliografia

- 1) Introduction to Computational Chemistry. Frank Jensen. ISBN: 0470011874 JohnWiley & Sons Ltd. (2007).
- 2) Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models. Christopher J. Cramer. ISBN: 0470091827. JohnWiley & Sons Ltd. (2004).
- 3) Molecular Modelling. Principles and Applications. Andrew R Leach. ISBN: 978-0-582-38210-7. Pearson (2001).