

**Simulació Biomolecular**

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 d'idiomes a l'assignatura**

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, analitzar i sintetitzar informació.
- Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
- "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, analitzar i sintetitzar informació.
9. Gestionar l'organització i la planificació de tasques.
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

### SIMULACIÓ BIOMOLECULAR

1. Introducció a la modelització molecular de sistemes biològics
2. Mètodes de Mecànica Molecular pel càlcul de l'energia.
3. Exploració conformacional de biomolècules.
4. Interacció proteïna-ligand: Docking i disseny de fàrmacs.
5. Mètodes de simulació: Dinàmica Molecular.

6. Mètodes híbrids de càlcul de l'energia potencial: QM/MM
7. Càlculs de diferències d'energia lliure.
8. 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 plantejades pels professors a les sessions presencials, en la realització de les pràctiques, i en l'elaboració dels treballs de l'assignatura que comportaran una part de recerca bibliogràfica.

### Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
<b>Tipus: Dirigides</b>			
Classes pràctiques	18	0,72	2, 7, 8, 9, 10, 11, 14, 15, 17, 18, 19, 21, 22
Classes Teòriques	36	1,44	2, 6, 7, 10, 11, 14, 15, 18, 22
<b>Tipus: Supervisades</b>			
Tutories	2	0,08	8, 9
<b>Tipus: Autònomes</b>			
Estudi	70	2,8	1, 2, 3, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 13, 14, 15, 17, 18, 19
Recerca bibliogràfica	2	0,08	8, 13
Resolució quizzes//Realització informes pràctiques i treballs	12	0,48	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22

## Avaluació

### AVALUACIÓ

Aquesta assignatura fa servir l'avaluació continuada per a determinar l'assoliment de continguts i competències per part des estudiants.

Aquesta avaluació continuada constarà de dos tipus d'activitats: **exàmens i activitats de seguiment**.

### Exàmens (70%)

Es realitzaran dos exàmens parcials sobre el contingut de l'assignatura: Parcial 1 (P1) (35%) i Parcial 2 (P2) (35%).

### Activitats de seguiments (30%)

Al llarg del curs es realitzaran dues sèries (S1 i S2) d'activitats de seguiment (quizzes, informes pràctiques, treballs) que serviran com evidències del treball personal de l'alumne. Aquestes activitats no són recuperables.

### QUALIFICACIONS

Per a **superar l'assignatura per curs** s'han de complir les tres condicions següents:

- 1) Nota de cada parcial (NP1 i NP2) igual o superior a 4,0.
- 2) Nota Final assignatura =  $0,70 * (0,50 * (NP1+NP2)) + 0,30 * (0,50 * (NS1 + NS2))$  igual o superior a 5,0.
- 3) Haver assistit a totes les sessions de pràctiques.

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

Els alumnes que no superin l'assignatura per curs o vulguin millorar nota podran presentar-se a **l'examen final que inclourà tota la matèria del curs**.

La nota de l'examen final substituirà la nota que es pogués tenir del conjunt dels dos parcials i, per tant, tindrà un pes del 70%.

### Activitats d'avaluació

Títol	Pes	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Activitats seguiment	30	4	0,16	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22
Exàmens	70	6	0,24	1, 3, 4, 5, 7, 8, 9, 11, 16, 17, 19, 21

### Bibliografia

1) **Introduction to Computational Chemistry**. Frank Jensen. ISBN: 0470011874 JohnWiley & Sons Ltd. (2007).

2) **Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models**. Cristopher 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).