

Simulación Biomolecular

Código: 102517
Créditos ECTS: 6

Titulación	Tipo	Curso	Semestre
2502444 Química	OT	4	0

La metodología docente y la evaluación propuestas en la guía pueden experimentar alguna modificación en función de las restricciones a la presencialidad que impongan las autoridades sanitarias.

Contacto

Nombre: Laura Masgrau Fontanet

Correo electrónico: Laura.Masgrau@uab.cat

Uso de idiomas

Lengua vehicular mayoritaria: catalán (cat)

Algún grupo íntegramente en inglés: No

Algún grupo íntegramente en catalán: Sí

Algún grupo íntegramente en español: No

Equipo docente

Àngels González Lafont

Prerequisitos

Termodinámica Química

Química Cuántica

Química Física

No es imprescindible tener ningún conocimiento previo en Bioquímica.

Objetivos y contextualización

El objetivo de esta asignatura es introducir al alumnado los principios básicos de la simulación biomolecular como herramienta para interpretar a nivel atómico como se desarrollan los procesos biológicos y las aplicaciones biomédicas y biotecnológicas de las biomoléculas (fármacos, nanopartículas, vacunas...).

La simulación biomolecular se basa en la modelización molecular del sistema biológico o biomolécula, lo que implica una serie de etapas que se trabajaran en este curso tanto a nivel teórico como práctico, en un equilibrio entre conceptos, fundamentos físicos y práctica:

- 1) Cálculo de la energía del sistema para una disposición (estructura 3D) dada de sus átomos y moléculas utilizando métodos de la Mecánica Molecular y de la Mecánica Cuántica;
- 2) Estudio de las técnicas computacionales que permiten determinar la variación de la energía del sistema en función de sus coordenadas:
 - a) Técnicas de Docking;
 - b) Técnicas de minimización de la energía;

c) Técnicas de Dinámica Molecular;

d) Métodos de cálculo de la energía libre.

Paralelamente se utilizaran dichos métodos tanto para el estudio de aspectos básicos de las biomoléculas y sus funciones, como en aplicaciones al diseño de fármacos y al estudio de la catálisis enzimática.

Competencias

- Adaptarse a nuevas situaciones.
- Aprender de forma autónoma.
- Comunicarse de forma oral y escrita en la lengua nativa.
- Demostrar iniciativa y espíritu emprendedor.
- Demostrar que comprende los conceptos, principios, teorías y hechos fundamentales de las diferentes áreas de la Química.
- Gestionar la organización y planificación de tareas.
- Gestionar, analizar y sintetizar información.
- Interpretar los datos obtenidos mediante medidas experimentales, incluyendo el uso de herramientas informáticas, identificar su significado y relacionarlos con las teorías químicas, físicas o biológicas apropiadas.
- Mostrar sensibilidad hacia temas medioambientales.
- Obtener información, incluyendo la utilización de medios telemáticos.
- Proponer ideas y soluciones creativas.
- Razonar de forma crítica.
- Reconocer y analizar problemas químicos y plantear respuestas o trabajos adecuados para su resolución, incluyendo en casos necesarios el uso de fuentes bibliográficas.
- Resolver problemas y tomar decisiones.
- Trabajar en equipo y cuidar las relaciones interpersonales de trabajo.
- Utilizar la informática para el tratamiento y presentación de información.

Resultados de aprendizaje

1. Adaptarse a nuevas situaciones.
2. Analizar trayectorias de dinámica molecular.
3. Aprender de forma autónoma.
4. Comunicarse de forma oral y escrita en la lengua nativa.
5. Demostrar iniciativa y espíritu emprendedor.
6. Determinar los cambios estructurales y energéticos asociados a un camino de reacción química.
7. Distinguir entre los métodos computacionales aplicados a las biomoléculas.
8. Gestionar la organización y planificación de tareas.
9. Gestionar, analizar y sintetizar información.
10. Manejar a nivel básico la simulación por ordenador.
11. Manejar la metodología básica de la química cuántica y mecánica molecular.
12. Mostrar sensibilidad hacia temas medioambientales.
13. Obtener información, incluyendo la utilización de medios telemáticos.
14. Plantear simulaciones en fase condensada.
15. Producir simulaciones de interacciones proteína-ligando.
16. Proponer ideas y soluciones creativas.
17. Razonar de forma crítica.
18. Reconocer las bases de los sistemas operativos y lenguaje informáticos.
19. Resolver problemas y tomar decisiones.
20. Trabajar en equipo y cuidar las relaciones interpersonales de trabajo.
21. Utilizar la informática para el tratamiento y presentación de información.
22. Visualizar biomoléculas y ciertas propiedades estructurales por medio de programas de visualización.

Contenido

SIMULACIÓN BIOMOLECULAR

1. Introducción a la modelización molecular.
2. Biomoléculas: estructura y función. Una visión general.
3. Métodos de Mecánica Molecular para el cálculo de la energía.
4. Exploración conformacional en biomoléculas.
5. Interacción proteína-ligando: Técnicas de Docking y diseño de fármacos.
6. Métodos de simulación: Dinámica Molecular.
7. Métodos híbridos de cálculo de la energía potencial: QM/MM
8. Cálculos de diferencias de energía libre.
9. Catálisis enzimática: mecanismos y velocidad de reacción.

Metodología

La asignatura de SIMULACIÓN BIOMOLECULAR es una optativa de 6 ECTS perteneciente a la mención de QUÍMICA BIOLÓGICA pero que también se puede cursar fuera de la mención.

La metodología docente de la asignatura consiste en clases teóricas en el aula y clases prácticas en el aula de informática dirigidas por los profesores responsables de la asignatura. Las clases teóricas y prácticas se completan con horas de tutoría supervisadas por los profesores a fin de resolver dudas. El alumno tiene que trabajar de forma autónoma sobre los contenidos teóricos y las cuestiones planteadas por los profesores a las sesiones presenciales, en la realización de las prácticas, y en la elaboración de los trabajos de la asignatura que conllevarán una parte de investigación bibliográfica.

Nota: se reservarán 15 minutos de una clase dentro del calendario establecido por el centro o por la titulación para que el alumnado rellene las encuestas de evaluación de la actuación del profesorado y de evaluación de la asignatura o módulo.

Actividades

Título	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Tipo: Dirigidas			
Clases teóricas	34	1,36	2, 6, 7, 10, 11, 14, 15, 18, 22
Sesiones prácticas	18	0,72	2, 7, 8, 9, 10, 11, 14, 15, 17, 18, 19, 21, 22
Tipo: Supervisadas			
Tutorías	2	0,08	8, 9
Tipo: Autónomas			
Búsquedas bibliográficas	2	0,08	9, 13
Estudio	70	2,8	1, 2, 3, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 13, 14, 15, 17, 18, 19
Quizzes/Informes de prácticas/Entregas de	14	0,56	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18,

Evaluación

Esta asignatura utiliza la evaluación continuada para ayudar y valorar el proceso de aprendizaje de contenidos y competencias por parte del alumnado.

Esta evaluación continuada constará de dos tipos de actividades: exámenes y actividades de seguimiento.

Exámenes (70% de la nota total)

Se realizarán dos exámenes parciales sobre el contenido de la asignatura: Parcial 1 (P1) (35%) y Parcial 2 (P2) (35%).

Actividades de seguimiento (30%)

A lo largo del curso se realizarán dos series (S1 y S2) de actividades de seguimiento (quizzes, informes de prácticas, trabajos) que servirán como evidencias del trabajo individual del alumno y de su aprendizaje. Estas actividades no son recuperables.

CALIFICACIONES

Para superar la asignatura por curso deben cumplirse las tres condiciones siguientes:

- 1) Nota de cada parcial (NP1 y NP2) igual o superior a 3,5 y la nota mínima media de los dos exámenes es 4,0 (todo esto sobre una escala de 10).
- 2) Nota Final asignatura = $0,70 * (0,50 * (NP1 + NP2)) + 0,30 * (0,50 * (NS1 + NS2))$ igual o superior a 5,0.
- 3) Haber asistido a todas las sesiones de prácticas y entragdo el correspondiente informe en caso de haberlo.

Si no se llegara a los mínimos 1) y/o 2), al final del curso se podrá recuperar uno o los dos exámenes parciales. La nota obtenida en la recuperación sustituirá a la obtenida en el primer intento.

La realización de las prácticas es obligatoria.

Para participar en la recuperación es necesario haber sido previamente evaluado en un conjunto de actividades el peso de las cuales equivalga a un mínimo de dos terceras partes (66,6 %) de la calificación total de la asignatura. No es posible, así, hacer la recuperación de un examen parcial que no se haya hecho.

Si el alumno sólo ha sido evaluado como máximo de un 25% de las pruebas y abandona, la calificación final será de NO EVALUABLE.

Actividades de evaluación

Título	Peso	Horas	ECTS	Resultados de aprendizaje
Actividades de seguimiento	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
Exámenes	70%	6	0,24	1, 3, 4, 5, 7, 8, 9, 11, 16, 17, 19, 21

Bibliografía

- 1) Introduction to Computational Chemistry. Frank Jensen. ISBN: 0470011874 John Wiley & Sons Ltd. (2007). (Documento electrónico disponibles en el Servei de Biblioteques de la UAB)

2) Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models. Christopher J. Cramer. ISBN: 0470091827. John Wiley & Sons Ltd. (2004). (Documento físico y electrónico disponibles en el Servei de Biblioteques de la UAB)

3) Molecular Modelling. Principles and Applications. Andrew R Leach. ISBN: 978-0-582-38210-7. Pearson (2001). (Documento físico disponibles en el Servei de Biblioteques de la UAB)

Software

USCF Chimera

Autodock Vina

CHARMM-GUI