

Simulació Biomolecular

Codi: 102517

Crèdits: 6

Titulació	Tipus	Curs	Semestre
2502444 Química	OT	4	1

Professor/a de contacte

Nom: Laura Masgrau Fontanet

Correu electrònic: laura.masgrau@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

Àngels Gonzalez Lafont

Prerequisits

Termodinàmica i Cinètica Químiques (Fonaments de Química 2 i Termodinàmica i Cinètica)

Química Quàntica

No és imprescindible un coneixement previ de bioquímica.

Objectius

L' objectiu d'aquesta assignatura és introduir l'alumnat als principis bàsics de la simulació biomolecular que permet interpretar a nivell atòmic com es desenvolupen els processos biològics i les aplicacions biomèdiques i biotecnològiques de les biomolècules (fàrmacs, nanopartícules, vacunes...).

La simulació biomolecular es basa en un procés de modelització molecular del sistema biològic o biomolècula que implica una sèrie d'etapes que es treballaran en aquest curs tant a nivell teòric com pràctic, en un equilibri entre conceptes, fonaments físics i pràctiques:

1) Càlcul de l'energia del sistema donada una determinada disposició (estructura 3D) 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 Docking;

b) Tècniques de minimització de l'energia;

c) Tècniques de Dinàmica Molecular;

d) Mètodes de càlcul de l'energia lliure.

Paral·lelament es farà ús d'aquestes diferents metodologies tant en l'estudi d'aspectes bàsics de les biomolècules i les seves funcions, com en aplicacions al disseny de fàrmacs i a l'estudi de la catàlisi enzimàtica.

Competències

- "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."
- 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.
- 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-l·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.

2. Biomolècules: estructura i funció. Una visió general.
3. Mètodes de Mecànica Molecular pel càlcul de l'energia.
4. Exploració conformacional de biomolècules.
5. Interacció proteïna-ligand: Tècniques de Docking i disseny de fàrmacs.
6. Mètodes de simulació: Dinàmica Molecular.
7. Mètodes híbrids de càlcul de l'energia potencial: QM/MM
8. Càlculs de diferències d'energia lliure.
9. Catàlisi enzimàtica: mecanismes i velocitat de reacció.

Metodologia

L'assignatura SIMULACIÓ BIOMOLECULAR és una optativa de 6 ECTS que es pot cursar dins de la menció de QUÍMICA BIOLÒGICA o com a optativa general.

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 completen amb hores de tutoria supervisades pels professors a fi de resoldre dubtes. L'alumne ha 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.

Nota: es reservaran 15 minuts d'una classe, dins del calendari establert pel centre/titulació, per a la complementació per part de l'alumnat de les enquestes d'avaluació de l'actuació del professorat i d'avaluació de l'assignatura/mòdul.

Activitats formatives

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Tipus: Dirigides			
Classes Teòriques	34	1,36	2, 6, 7, 10, 11, 14, 15, 18, 22
Classes pràctiques	18	0,72	2, 7, 8, 9, 10, 11, 14, 15, 17, 18, 19, 21, 22
Tipus: Supervisades			
Tutories	2	0,08	8, 9
Tipus: Autònomes			
Estudi	70	2,8	1, 2, 3, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 13, 14, 15, 17, 18, 19
Recerca bibliogràfica	2	0,08	9, 13
Resolució quizzes//Realització informes pràctiques i treballs	14	0,56	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21, 22

Avaluació

Aquesta assignatura fa servir l'avaluació continuada per a ajudar a l'aprenentatge i determinar l'assoliment de continguts i competències per part dels 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 i haver entregat l'informe en cas d'haver-n'hi.

Si no s'arriba als mínims 1) i/o 2), al final de curs es podrà recuperar un o els dos exàmens parcials. La nota obtinguda a la recuperació substituirà l'obtinguda en el primer intent.

La realització de les pràctiques és obligatòria.

Per participar a la recuperació cal haver estat prèviament avaluat en un conjunt d'activitats el pes de les quals equivalgui a un mínim de dues terceres parts de la qualificació total de l'assignatura. No és possible, així, fer la recuperació d'un examen parcial que no s'hagi fet.

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.

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 John Wiley & Sons Ltd. (2007). (Document electrònic disponible al Servei de Biblioteques de la UAB)
- 2) Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models. Christopher J. Cramer. ISBN: 0470091827. John Wiley & Sons Ltd. (2004). (Document físic i electrònic disponible al Servei de Biblioteques de la UAB)
- 3) Molecular Modelling. Principles and Applications. Andrew R Leach. ISBN: 978-0-582-38210-7. Pearson (2001). (Document físic disponible al Servei de Biblioteques de la UAB)

Programari

USCF Chimera

Autodock Vina

CHARMM-GUI