

Titulació	Tipus	Curs
Química	OT	4

Professor/a de contacte

Nom: Laura Masgrau Fontanet

Correu electrònic: laura.masgrau@uab.cat

Equip docent

Maria dels Angels Gonzalez Lafont

Idiomes dels grups

Podeu consultar aquesta informació al [final](#) del document.

Prerequisits

Es recomana que l'alumnat hagi superat les següents assignatures: Termodinàmica i Cinètica Químiques (Fonaments de Química 2 i Termodinàmica i Cinètica), Química Quàntica.

La superació de bioquímica no és imprescindible.

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

- 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-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.

Activitats formatives i Metodologia

Títol	Hores	ECTS	Resultats d'aprenentatge
Tipus: Dirigides			
Classes pràctiques	18	0,72	2, 7, 8, 9, 10, 11, 14, 15, 17, 18, 19, 21, 22
Classes Teòriques	34	1,36	2, 6, 7, 10, 11, 14, 15, 18, 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	8, 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

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 pe professorat de l'assignatura. Les classes teòriques i pràctiques es completen amb hores de tutoria supervisades a fi de resoldre dubtes. L'alumnat ha de treballar de forma autònoma els

continguts teòrics i les qüestions plantejades pel professorat 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, perquè els alumnes completin les enquestes d'avaluació de l'actuació del professorat i d'avaluació de l'assignatura.

Avaluació

Activitats d'avaluació continuada

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

L'assignatura presenta dues parts clarament definides (1 i 2) corresponents a la primera i segona part del semestre. S'avaluaran de manera independent.

El sistema d'avaluació estandard d'aquesta assignatura consisteix en unes proves d'avaluació continuada amb activitats de seguiment així com d'exàmens parcials. L'alumnat, si ho desitja, pot demanar fer una avaluació única.

AVALUACIÓ CONTINUADA

En aquesta modalitat, la ponderació de cada tipologia d'activitats és la següent:

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'alumnat. 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 5,0.
- 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/a només ha estat avaluat/da com a màxim d'un 25% de les proves i abandona, la qualificació final serà de NO AVALUABLE.

AVALUACIÓ ÚNICA

L'alumnat que s'hagi acollit a la modalitat d'avaluació única haurà de realitzar una prova final que consistirà en un examen de tot el temari de l'assignatura. Les pràctiques continuen sent obligatòries i les seves notes comptaran en l'avaluació final.

La prova d'avaluació única es realitzarà el dia en què els estudiants de l'avaluació continuada fan l'examen del segon parcial.

La qualificació de l'estudiant serà:

Nota final de l'assignatura = (Nota de la prova final · 80 + Nota de pràctiques · 20)/100

Tant la nota de la prova final com la de pràctiques ha de ser superior o igual a 5.

Si la nota final no arriba a 5, l'estudiant té una altra oportunitat de superar l'assignatura mitjançant l'examen de recuperació que se celebrarà en la data que fixi la coordinació de la titulació. En aquesta prova es podrà recuperar el 80% de la nota corresponent a la part de teoria. La part de les pràctiques no és recuperable.

Sense perjudici d'altres mesures disciplinàries que s'estimin oportunes, es qualificarà amb un zero l'alumnat que hagi comès irregularitats que puguin conduir a la variació de la qualificació d'un acte d'avaluació. Per tant, la còpia, el plagi, l'engany, deixar copiar, etc., en qualsevol de les activitats d'avaluació, implicarà suspendre-la amb un zero.

Bibliografia

- 1) Introduction to Computational Chemistry. Frank Jensen. ISBN: 0470011874 JohnWiley & Sons Ltd. (2007). (Document electrònic disponible al Servei de Biblioteques de de la UAB)
- 2) Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models. Cristopher J. Cramer. ISBN: 0470091827. JohnWiley & Sons Ltd. (2004). (Document físic i electrònic disponible al Servei de Biblioteques de 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 de la UAB)

Programari

USCF Chimera

Autodock Vina

CHARMM-GUI

Grups i idiomes de l'assignatura

La informació proporcionada és provisional fins al 30 de novembre de 2025. A partir d'aquesta data, podreu consultar l'idioma de cada grup a través daquest [enllaç](#). Per accedir a la informació, caldrà introduir el CODI de l'assignatura

Nom	Grup	Idioma	Semestre	Torn
(PLAB) Pràctiques de laboratori	1	Català	primer quadrimestre	matí-mixt
(TE) Teoria	1	Català	primer quadrimestre	matí-mixt