Guía docente

Identificación de la asignatura

Asignatura / Grupo	11366 - Modelización Molecular de Biomoléculas / 1
Titulación	Máster Universitario en Ciencia y Tecnología Química
Créditos	6
Período de impartición	Segundo semestre
Idioma de impartición	Castellano

Profesores

	Horario de atención a los alumnos					
Profesor/a	**Hora de inicio**	**Hora de fin**	**Día**	**Fecha inicial**	**Fecha final**	**Despacho / Edificio**
Rodrigo Casasnovas Perera rodrigo.casasnovas@uib.es	Hay que concertar cita previa con el/la profesor/a para hacer una tutoría					

Contextualización

La modelización molecular se està mostrando como una técnica muy potente para estudiar sistemas que no pueden traterse experimentalmente, para obtenerpropiedades que difíciles de medir o para complementar la interpretación de datos experimentales de sistemas complejos.

Como los sistemas biológicos están formados por un número elevado de átomos, es necesario emplear técnicas de mecánica molecular según campos de fuerza clásicos. Se comparan y analizan diferentes campos de fuerza y sus ámbitos de aplicación. Las técnicas de simulación de dinámica molecular y Montecarlo se introducen como herramientas básicas para la obtención de propiedades dinámicas y estructurales de biomoléculas. Por último se presenta un tema introductorio al diseño computacional de fármacos.

En resumen, el objetivo es que los estudiantes sean capaces de analizar qué sistema biológico deben estudiar y la información que desean obtener para decidir cuál es la/s técnica/s computacional/es idónea/s para atacar el problema.

Requisitos

Competencias

Específicas

* No tiene

Fecha de publicación: 22/07/2019

Antes de imprimir este documento, considere si es necesario hacerlo. El medio ambiente es cosa de todos.
©2019 Universidad de las Illes Balears. Cra. de Valldemossa, km 7.5. Palma (Illes Balears). Tel.: +34 - 971 17 30 00. E-07122. CIF: Q0718001A

Documento generado automaticamente a las 1240:00 del 22/07/2019

Genéricas

* G1. Capacidad de abstracción, análisis y síntesis
* G3. Habilidades para buscar, procesar y analizar información procedente de fuentes diversas

Básicas

* Se pueden consultar las competencias básicas que el estudiante tiene que haber adquirido al finalizar el máster en la siguiente dirección: http://estudis.uib.cat/es/master/comp_basiques/

Contenidos

Contenidos temáticos

1. Fuerzas intermoleculares
   Descripción de fuerzas intermoleculares
2. Mecánica molecular
   Bases de la Mecànica Molecular.

   Tratamiento de fuerzas intramoleculares desde la mecánica clásica.

   Tratamiento de fuerzas intermoleculares desde la mecánica clásica.

   Campos de fuerza
3. Técnicas de simulación
   Dinámica molecular

   Montecarlo

   Introducción a métodos de energía libre y "enhanced sampling"

   Métodos de visualización de simulaciones y biomoléculas

   Análisis de simulaciones para el cálculo de propiedades estructurales y dinámicasde biomoléculas
4. Diseño de fármacos
   Interacciones fármaco-receptor

   Modelización Molecular y Quimioinformática

Metodología docente

La metodología presencial se basa en los siguientes puntos: las clases expositivas y prácticas computacionales.

La metodología no presencial consta de:

Ejercicios de respuesta breve para consolidar los conocimientos teóricos adquiridos.

Lectura de un artículo científico y análisis crítico del mismo en el que se dé respuesta a un problema sobre biomoléculas mediante el uso (exclusivo o combinado con experimentos) de simulaciones computacionales.

Fecha de publicación: 22/07/2019

Antes de imprimir este documento, considere si es necesario hacerlo. El medio ambiente es cosa de todos.
©2019 Universidad de las Illes Balears. Cra. de Valldemossa, km 7.5. Palma (Illes Balears). Tel.: +34 - 971 17 30 00. E-07122. CIF: Q0718001A

Documento generado automaticamente a las 1240:00 del 22/07/2019

Una vez adquiridos los conocimientos teóricos y prácticos de las simulaciones, se planteará a los alumnos un problema sobre una biomolécula. Los alumnos deberán pensar cómoresolverlo realizando simulaciones computacionales ydecidir cómo analizar los datos para dar respuesta al problema planteado.

Actividades de trabajo presencial (1,44 créditos, 36 horas)

Modalidad	Nombre	Tip. agr.	Descripción	Horas
Clases teóricas	Clases teóricas	Grupo grande (G)	A1-Clases teóricas. M1-Método expositivo (lección magistral). El profesor desarrollará los contenidos teóricos con la ayuda de presentaciones de power point. Una parte de los contenidos se impartirán en inglés.	12
Clases de laboratorio	Clases de laboratorio	Grupo mediano (M)	A14-Clases prácticas en laboratorio. M6-Trabajo autónomo en el laboratorio. Realización de simulaciones computacionales de problemas reales. Visualización de simulaciones de biomoléculas. Análisis de simulaciones para calcular propiedades de biomoléculas. Parte de las clases estarán guiadas por elprofesor. En otra parte,el alumno deberá trabajar de forma autónoma con los conocimientos adquiridos previamente. El guión de prácticas estará en inglés.	24

Al inicio del semestre estará a disposición de los estudiantes el cronograma de la asignatura a través de la plataforma UIBdigital. Este cronograma incluirá al menos las fechas en las que se realizarán las pruebas de evaluación continua y las fechas de entrega de los trabajos. Asimismo, el profesor o la profesora informará a los estudiantes si el plan de trabajo de la asignatura se realizará a través del cronograma o mediante otra vía, incluida la plataforma Aula Digital.

Actividades de trabajo no presencial (4,56 créditos, 114 horas)

Modalidad	Nombre	Descripción	Horas
Estudio y trabajo autónomo individual	Preguntas breves	A8-Estudio y/o trabajo autónomo. Respuesta a preguntas breves para consolidar los contenidos teóricos de la asignatura. Una parte deberá redactarse en inglés.	20
Estudio y trabajo autónomo individual	Lectura y análisis crítico de artículos científicos	A8-Estudio y/o trabajo autónomo. Lectura y análisis crítico de un artículo científico donde se emplean simulaciones para el estudio de biomoléculas. El artículo estará en inglés.	84
Estudio y trabajo autónomo individual	Informe de prácticas	A8-Estudio y/o trabajo autónomo. El alumno deberá realizar simulaciones de biomoléculas, analizarlas y calcular propiedades de las biomoléculas para responder a un problema planteado por el profesor. Una parte del informe deberá estar escrito en inglés.	10

Fecha de publicación: 22/07/2019

Antes de imprimir este documento, considere si es necesario hacerlo. El medio ambiente es cosa de todos.
©2019 Universidad de las Illes Balears. Cra. de Valldemossa, km 7.5. Palma (Illes Balears). Tel.: +34 - 971 17 30 00. E-07122. CIF: Q0718001A

Documento generado automaticamente a las 1240:00 del 22/07/2019

Riesgos específicos y medidas de protección

Las actividades de aprendizaje de esta asignatura no conllevan riesgos específicos para la seguridad y salud de los alumnos y, por tanto, no es necesario adoptar medidas de protección especiales.

Evaluación del aprendizaje del estudiante

Fraude en elementos de evaluación

De acuerdo con el artículo 33 del Reglamento Académico, "con independencia del procedimiento disciplinario que se pueda seguir contra el estudiante infractor, la realización demostrablemente fraudulenta de alguno de los elementos de evaluación incluidos en guías docentes de las asignaturas comportará, a criterio del profesor, una minusvaloración en su calificación que puede suponer la calificación de «suspenso 0» en la evaluación anual de la asignatura".

Preguntas breves

Modalidad	Estudio y trabajo autónomo individual
Técnica	Trabajos y proyectos **(no recuperable)**
Descripción	A8-Estudio y/o trabajo autónomo. Respuesta a preguntas breves para consolidar los contenidos teóricos de la asignatura. Una parte deberá redactarse en inglés.
Criterios de evaluación	EV14-Trabajos y proyectos, por escrito.Se evaluan las competencias G1, G3, CB6 y CB7.

Porcentaje de la calificación final: 20%

Lectura y análisis crítico de artículos científicos

Modalidad	Estudio y trabajo autónomo individual
Técnica	Trabajos y proyectos **(no recuperable)**
Descripción	A8-Estudio y/o trabajo autónomo. Lectura y análisis crítico de un artículo científico donde se emplean simulaciones para el estudio de biomoléculas. El artículo estará en inglés.
Criterios de evaluación	EV14-Trabajos y proyectos, por escrito.Se evaluan las competencias G1, G3, CB6.

Porcentaje de la calificación final: 40%

Fecha de publicación: 22/07/2019

Antes de imprimir este documento, considere si es necesario hacerlo. El medio ambiente es cosa de todos.
©2019 Universidad de las Illes Balears. Cra. de Valldemossa, km 7.5. Palma (Illes Balears). Tel.: +34 - 971 17 30 00. E-07122. CIF: Q0718001A

Documento generado automaticamente a las 1240:00 del 22/07/2019

Informe de prácticas

Modalidad	Estudio y trabajo autónomo individual
Técnica	Informes o memorias de prácticas **(no recuperable)**
Descripción	A8-Estudio y/o trabajo autónomo. El alumno deberá realizar simulaciones de biomoléculas, analizarlas y calcular propiedades de las biomoléculas para responder a un problema planteado por el profesor. Una parte del informe deberá estar escrito en inglés.
Criterios de evaluación	EV10-Memorias de prácticas. Se evaluan las competencias G1, G3, CB6 y CB7.

Porcentaje de la calificación final: 40%

Recursos, bibliografía y documentación complementaria

Bibliografía básica

Leach A.R.*Molecular Modelling. Principles and Aplicactions (2nd edition)*, Addison Wesley Longman Limited, 2001
Gasteiger J. and Engel T.,*Chemoinformatics*, Wiley, 2003
Mitland G.C., Rigby M., Smith E.B., Wakeham W.A.,*Intermolecular Forces: their origin and determination (2nd edition)*, Clarendon Press, Oxford, 1987

Bibliografía complementaria

Rapaport D.C.,*The Art of Molecular Dynamics Simulations (2nd edition)*, Cambridge, 2004
Oprea T.I.,*Chemoinformatics in Drug Discovery*, Wiley, 2004

Otros recursos

Manual del software a utilizar
Artículos científicos seleccionados y relacionados con las actividades propuestas
Presentacions de las clases disponibles en Aula Digital

Fecha de publicación: 22/07/2019

Antes de imprimir este documento, considere si es necesario hacerlo. El medio ambiente es cosa de todos.
©2019 Universidad de las Illes Balears. Cra. de Valldemossa, km 7.5. Palma (Illes Balears). Tel.: +34 - 971 17 30 00. E-07122. CIF: Q0718001A

Documento generado automaticamente a las 1240:00 del 22/07/2019