



## 1. DATOS GENERALES

Asignatura: MODELIZACIÓN APLICADA A LAS BIOMOLÉCULAS

Tipología: OPTATIVA

Grado: 341 - GRADO EN BIOQUÍMICA

Centro: 501 - FACULTAD CC. AMBIENTALES Y BIOQUÍMICA TO

Curso: 4

Lengua principal de impartición: Español

Uso docente de otras lenguas:

Página web:

Código: 13341

Créditos ECTS: 4.5

Curso académico: 2018-19

Grupo(s): 40

Duración: Primer cuatrimestre

Segunda lengua: Inglés

English Friendly: N

Bilingüe: N

Profesor: BOYKO YUDA KOEN --- - Grupo(s): 40

| Edificio/Despacho    | Departamento   | Teléfono | Correo electrónico | Horario de tutoría |
|----------------------|----------------|----------|--------------------|--------------------|
| INAMOL, despacho 1.4 | QUÍMICA FÍSICA | 5571     | boyko.koen@uclm.es |                    |

Profesor: JUAN ANGEL ORGANERO GALLEGO - Grupo(s): 40

| Edificio/Despacho | Departamento   | Teléfono | Correo electrónico         | Horario de tutoría |
|-------------------|----------------|----------|----------------------------|--------------------|
| Sabatini          | QUÍMICA FÍSICA | 5433     | juanangel.ogallego@uclm.es |                    |

## 2. REQUISITOS PREVIOS

No hay requisitos previos.

## 3. JUSTIFICACIÓN EN EL PLAN DE ESTUDIOS, RELACIÓN CON OTRAS ASIGNATURAS Y CON LA PROFESIÓN

Los métodos computacionales de predicción de estructura nos ofrecen información valiosa, útil para explicar gran parte de los aspectos funcionales que se pueden derivar del conocimiento estructural. En la asignatura de modelización aplicada a las biomoléculas (proteínas y ácidos nucleicos) abordaremos el estudio de la estructura y funciones de biomoléculas con la ayuda de modelos teóricos que simulan tanto estructuras como procesos de interacción entre biomoléculas y estas con ligandos. Esta asignatura introducirá al alumno los conceptos y técnicas básicas de modelización molecular haciendo especial hincapié en su utilidad de cara a una mejor comprensión de los procesos bioquímicos y en cómo pueden complementarse con técnicas estructurales. La modelización molecular aplicada al estudio de macromoléculas de interés biológico suscita un interés creciente en la industria e investigación debido a que por un lado nos permite predecir estructuras de biomoléculas que no pueden resolverse mediante técnicas de determinación estructural y por otro nos permiten conocer a escala atómica y molecular, las interacciones que ocurren entre biomoléculas entre sí y con ligandos, aspecto de gran interés en la industria farmacéutica.

## 4. COMPETENCIAS DE LA TITULACIÓN QUE LA ASIGNATURA CONTRIBUYE A ALCANZAR

## Competencias propias de la asignatura

| Código | Descripción                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |
|--------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| E01    | Expresarse correctamente con términos biológicos, físicos, químicos matemáticos e informáticos básicos.                                                                                                                                                                                                                                        |
| E13    | Manejar correctamente distintas herramientas informáticas para realizar cálculos numéricos, análisis de errores y estadísticos y representar los datos experimentales.                                                                                                                                                                         |
| G01    | Poseer y comprender los conocimientos en el área de Bioquímica y Biología Molecular a un nivel que, apoyándose en los libros de texto avanzados, incluya también aspectos de vanguardia de relevancia en la disciplina.                                                                                                                        |
| G02    | Saber aplicar los conocimientos de Bioquímica y Biología Molecular a la práctica profesional y poseer las competencias y habilidades intelectuales necesarias para dicha práctica, incluyendo capacidad de gestión de la información, análisis y síntesis, resolución de problemas, organización y planificación y generación de nuevas ideas. |
| G06    | Adquirir habilidades en el manejo de programas informáticos incluyendo el acceso a bases de datos bibliográficas, estructurales o de cualquier otro tipo útiles en Bioquímica y Biología Molecular.                                                                                                                                            |
| T02    | Conocimiento a nivel de usuario de las Tecnologías de la Información y la Comunicación (TIC).                                                                                                                                                                                                                                                  |
| T10    | Capacidad de autoaprendizaje y de obtener y gestionar información bibliográfica, incluyendo recursos en Internet.                                                                                                                                                                                                                              |

## 5. OBJETIVOS O RESULTADOS DE APRENDIZAJE ESPERADOS

## Resultados de aprendizaje propios de la asignatura

No se han establecido.

## Resultados adicionales

- Contextualizar y definir la disciplina de Modelado Molecular.
- Describir detalladamente las características estructurales de las biomoléculas.
- Definir las bases y los fundamentos teóricos de cálculo en la mecánica molecular.
- Conocer las bases de datos de secuencia y estructuras primarias y secundarias, simples y compuestas.
- Construir y modificar proteínas y ácidos nucleicos y entender la utilidad de las librerías de fragmentos moleculares.
- Conocer la metodología necesaria para llevar a cabo el modelado por homología de proteínas, complejos proteicos, y acoplamiento molecular.
- Comprender y aplicar los métodos de optimización de modelos moleculares: minimización y dinámica molecular.
- Predecir la función proteica a partir de modelos moleculares.
- Describir los pasos necesarios para descubrir moléculas biológicamente activas.

- Manejar aplicaciones informáticas necesarias para el modelado molecular.
- Aprender a utilizar las fuentes bibliográficas, páginas web, bases de datos y cualquier otro tipo de recurso de internet, y a realizar informes del trabajo realizado en el laboratorio informático.

## 6. TEMARIO

### Tema 1: Introducción al modelado molecular

### Tema 2: Construcción de moléculas

Tema 2.1 Modelización de estructuras de proteínas

Tema 2.2 Modelización de estructura de ARN

Tema 2.3 Modelización de mapas de interacción

### Tema 3: Sistemas de coordenadas, descriptores y formatos. Superficies moleculares

### Tema 4: Mecánica y Dinámica molecular de biomoléculas

Tema 4.1 Campos de fuerza

Tema 4.2 Optimización de geometrías

Tema 4.3 Exploración del Espacio conformacional

Tema 4.4 Dinámica Molecular

### Tema 5: Modelización del acoplamiento ó "docking" molecular: Interacciones proteína-ligando. Técnicas de docking y cribado in Silico

Tema 5.1 Identificación de Farmacóforo

### Tema 6: Establecimiento de relaciones estructura molecular- propiedades fisico-químicas. Descriptores Moleculares. QSAR 1D, 2D y 3D

## 7. ACTIVIDADES O BLOQUES DE ACTIVIDAD Y METODOLOGÍA

| Actividad formativa                                | Metodología                         | Competencias relacionadas (para títulos anteriores a RD 822/2021) | ECTS                                           | Horas        | Ev | Ob | Rec | Descripción                                                                                                                                                  |
|----------------------------------------------------|-------------------------------------|-------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------|--------------|----|----|-----|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Enseñanza presencial (Teoría) [PRESENCIAL]         | Método expositivo/Lección magistral | E01 E13 G01 G02 G06 T02 T10                                       | 1.2                                            | 30           | N  | -  | -   | Clases magistrales en las que se desarrollarán los contenidos teóricos.                                                                                      |
| Prácticas en aulas de ordenadores [PRESENCIAL]     | Prácticas                           | E01 E13 G01 G02 G06 T02 T10                                       | 0.4                                            | 10           | S  | S  | N   | Prácticas de Ordenador en las que se pondrán en práctica los conocimientos previos transmitidos en teoría.                                                   |
| Elaboración de memorias de Prácticas [AUTÓNOMA]    | Trabajo en grupo                    | E01 E13 G01 G02 G06 T02 T10                                       | 0.4                                            | 10           | S  | S  | S   | Elaboración de cuaderno de prácticas en el que se realizará un análisis científico de los resultados obtenidos de las prácticas realizadas con el ordenador. |
| Pruebas de progreso [PRESENCIAL]                   | Pruebas de evaluación               | E01 E13 G01 G02 G06 T02 T10                                       | 0.08                                           | 2            | S  | N  | N   | Prueba de progreso con cuestiones y/o problemas a resolver.                                                                                                  |
| Prueba final [PRESENCIAL]                          | Pruebas de evaluación               | E01 E13 G01 G02 G06 T02 T10                                       | 0.12                                           | 3            | S  | S  | S   | Prueba final con cuestiones y/o problemas, relacionados con los contenidos de la asignatura a resolver.                                                      |
| Estudio o preparación de pruebas [AUTÓNOMA]        | Trabajo autónomo                    | E01 E13 G01 G02 G06 T02 T10                                       | 2.3                                            | 57.5         | S  | N  | N   | Estudio y trabajo autónomo para la adquisición de los conocimientos y competencias de la asignatura.                                                         |
| <b>Total:</b>                                      |                                     |                                                                   | <b>4.5</b>                                     | <b>112.5</b> |    |    |     |                                                                                                                                                              |
| <b>Créditos totales de trabajo presencial: 1.8</b> |                                     |                                                                   | <b>Horas totales de trabajo presencial: 45</b> |              |    |    |     |                                                                                                                                                              |
| <b>Créditos totales de trabajo autónomo: 2.7</b>   |                                     |                                                                   | <b>Horas totales de trabajo autónomo: 67.5</b> |              |    |    |     |                                                                                                                                                              |

Ev: Actividad formativa evaluable

Ob: Actividad formativa de superación obligatoria

Rec: Actividad formativa recuperable

## 8. CRITERIOS DE EVALUACIÓN Y VALORACIONES

| Sistema de evaluación | Valoraciones          |                  | Descripción                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |
|-----------------------|-----------------------|------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|                       | Estudiante presencial | Estud. semipres. |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |
| Prueba final          | 45.00%                | 0.00%            | <p>se valorará:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>-Originalidad y profundidad de los razonamientos.</li> <li>- Adecuación de los planteamientos empleados en la resolución de ejercicios y/o problemas similares a los desarrollados en los seminarios y prácticas de ordenador.</li> <li>- Corrección en las respuestas teóricas y/o de problemas y ejercicios planteados.</li> <li>- Identificación, explicación y análisis de los resultados.</li> <li>- Claridad y organización en la redacción de las respuestas y análisis de los resultados.</li> <li>-En caso de no superar la prueba de progreso escrita, esta prueba final supondrá un 90% de la nota final.</li> </ul> |
|                       |                       |                  | Se valorará:                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               |

|                                                    |                |              |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |
|----------------------------------------------------|----------------|--------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Realización de actividades en aulas de ordenadores | 10.00%         | 0.00%        | - Corrección de las respuestas a las cuestiones que se planteen sobre las prácticas de ordenador y temas relacionados, así como el análisis de los resultados obtenidos.<br>- Identificación y explicación de los resultados.                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |
| Pruebas de progreso                                | 45.00%         | 0.00%        | Se trata de una prueba escrita de conocimientos. se valorará:<br>-Originalidad y profundidad de los razonamientos.<br>- Adecuación de los planteamientos empleados en la resolución de ejercicios y problemas similares a los desarrollados en los seminarios y prácticas de ordenador.<br>- Corrección en las respuestas teóricas y de problemas.<br>- Identificación y explicación de los resultados.<br>- Claridad y organización en la redacción de las respuestas.<br>La prueba de progreso se considerará superada si el alumno alcanza una calificación de 5 sobre 10 en dicha prueba, en cuyo caso no tendrá que examinarse de la materia superada, en la prueba final. |
| <b>Total:</b>                                      | <b>100.00%</b> | <b>0.00%</b> |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |

**Criterios de evaluación de la convocatoria ordinaria:**

En el caso de las prácticas en el aula de informática, el mínimo de nota requerido para aprobar la asignatura será de 5 sobre 10. La asignatura se considerará aprobada si se obtiene una nota mínima ponderada global de 5 sobre 10. Si en la prueba de progreso se ha obtenido una nota igual o superior a 5 sobre 10, el alumno no tendrá obligación de realizar, en la prueba final, las cuestiones relativas a los temas evaluados en la prueba de progreso.

**Particularidades de la convocatoria extraordinaria:**

Se conservarán en esta convocatoria las calificaciones obtenidas en las prácticas realizadas en el aula de ordenadores y en la prueba de progreso, siempre que estas se hayan superado con una calificación igual o superior a 5 sobre 10. Al no superar el mínimo de nota requerido (5/10), la memoria de prácticas es recuperable en la convocatoria extraordinaria

**Particularidades de la convocatoria especial de finalización:**

La prueba especial de finalización supondrá el 100 % de la nota de la asignatura y será requisito imprescindible para presentarse a las misma, tener las prácticas realizadas en el aula de ordenadores aprobadas.

| 9. SECUENCIA DE TRABAJO, CALENDARIO, HITOS IMPORTANTES E INVERSIÓN TEMPORAL |            |
|-----------------------------------------------------------------------------|------------|
| No asignables a temas                                                       |            |
| Horas                                                                       | Suma horas |

| 10. BIBLIOGRAFÍA, RECURSOS |                                                                             |                                       |           |                      |      |             |
|----------------------------|-----------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------|-----------|----------------------|------|-------------|
| Autor/es                   | Título/Enlace Web                                                           | Editorial                             | Población | ISBN                 | Año  | Descripción |
| D. C. Young                | Computational Drug Design: A Guide for Computational and Medicinal Chemists | Wiley                                 |           | 047012685X           | 2009 |             |
| Hans-Dieter Höeltje        | Molecular modeling basic principles and applications                        | Weinheim Wiley-VCH                    |           |                      | 2008 |             |
| A.R. Leach                 | Molecular Modelling. Principles and Applications                            | Addison Wesley y Longman              |           | ISBN-13: 978-0582382 | 2001 |             |
| Bruce R. Donald            | Algorithms in structural molecular biology                                  | Cambridge, Mass. ; London : MIT Press |           |                      | 2011 |             |