UNIVERSIDAD DE CASTILLA - LA MANCHA

GUÍA DOCENTE

1. DATOS GENERALES

Asignatura: MODELIZACIÓN APLICADA A LAS BIOMOLÉCULAS
Código: 13341
Tipología: OPTATIVA
Créditos ECTS: 4.5
Grado: 341 - GRADO EN BIOQUÍMICA
Curso académico: 2021-22
Centro: 501 - FACULTAD CC. AMBIENTALES Y BIOQUIMICA TO
Grupo(s): 40
Curso: 4
Duración: Primer cuatrimestre
Lengua principal de impartición: Español
Segunda lengua: Inglés
Uso docente de otras lenguas:
English Friendly: N
Página web:
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	previa cita por correo electrónico o Teams

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	Martes y Jueves de 10 a 13h previa cita por correo electrónico o Teams

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 nucléicos 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.Sistemas de coordenadas, descriptores y formatos. Superficies moleculares

Tema 2: Mecánica y Dinámica molecular de biomoléculas

- **Tema 2.1** Campos de fuerza
- **Tema 2.2** Optimización de geometrías
- **Tema 2.3** Exploración del Espacio conformacional
- **Tema 2.4** Dinámica Molecular

Tema 3: Modelización del acoplamiento ó "docking" molecular: Interacciones proteina-ligando. Técnicas de docking y cribado in Silico

- **Tema 3.1** Identificación de Farmacóforo

Tema 4: Establecimiento de relaciones estructura molecular- propiedades fisico-químicas. Descriptores Moleculares. QSAR 1D, 2D y 3D

Tema 5: Construcción de Moléculas

Tema 6: Modelización de estructuras de proteinas

Tema 7: Modelización de estructura de ARN

Tema 8: Modelización de mapas de interacción

7. ACTIVIDADES O BLOQUES DE ACTIVIDAD Y METODOLOGÍA

Actividad formativa	Metodología	Competencias relacionadas (para títulos anteriores a RD 822/2021)	ECTS	Horas	Ev	Ob	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	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	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	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	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	N	-	Estudio y trabajo autónomo para la adquisición de los conocimientos y competencias de la asignatura.
		Total:	**4.5**	**112.5**			
		Créditos totales de trabajo presencial: 1.8					**Horas totales de trabajo presencial: 45**
		Créditos totales de trabajo autónomo: 2.7					**Horas totales de trabajo autónomo: 67.5**

Ev: Actividad formativa evaluable
Ob: Actividad formativa de superación obligatoria (Será imprescindible su superación tanto en evaluación continua como no continua)

8. CRITERIOS DE EVALUACIÓN Y VALORACIONES

Sistema de evaluación	Evaluacion continua	Evaluación no continua*	Descripción
Realización de actividades en aulas de ordenadores	10.00%	10.00%	Se valorará: - Corrección de las respuestas a las cuestiones que se planteen sobre las prácticas de ordenador y temas relacionados en las memorias de prácticas, así como el análisis de los resultados obtenidos.
Pruebas de progreso	45.00%	45.00%	Se trata de una prueba escrita de conocimientos. se valorará: -Originalidad y profundidad de los razonamientos. - Corrección en las respuestas teóricas y de problemas. - Identificación y explicación de los resultados. - Claridad y organización en la redacción de las respuestas. La prueba de progreso se podrá ponderar con el resto de actividades evaluables si se obtiene una calificación mínima de 4 sobre 10 en dicha prueba, en cuyo caso no tendrá que examinarse de la materia superada, en la prueba final.
Prueba final	45.00%	45.00%	Se trata de una prueba escrita de conocimientos. se valorará: -Originalidad y profundidad de los razonamientos. - Corrección en las respuestas teóricas y de problemas. - Identificación y explicación de los resultados. - Claridad y organización en la redacción de las respuestas.

			La prueba de progreso se podrá ponderar con el resto de actividades evaluables si se obtiene una calificación mínima de 4 sobre 10 en dicha prueba. En caso de no superar la prueba de progreso escrita, esta prueba final supondrá un 90% de la nota final.
Total:	**100.00%**	**100.00%**	

** En **Evaluación no continua** se deben definir los porcentajes de evaluación según lo dispuesto en el art. 4 del Reglamento de Evaluación del Estudiante de la UCLM, que establece que debe facilitarse a los estudiantes que no puedan asistir regularmente a las actividades formativas presenciales la superación de la asignatura, teniendo derecho (art. 12.2) a ser calificado globalmente, en 2 convocatorias anuales por asignatura, una ordinaria y otra extraordinaria (evaluándose el 100% de las competencias).*

Criterios de evaluación de la convocatoria ordinaria:

Evaluación continua:

Se ha de obtener una nota mínima de 4 sobre 10, en una determinada actividad evaluable, para que pondere en la calificación final . Si en la prueba de progreso se ha obtenido una nota igual o superior a 4 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. La nota media ponderada de todas la actividades deberá ser mayor o igual a 5 para aprobar la asignatura. La realización de las prácticas es obligatoria y no recuperable. Solo podrán ser evaluados aquellos alumnos que las hayan realizado. La evaluación si es recuperable.

Evaluación no continua:

Se ha de obtener una nota mínima de 4 sobre 10, en una determinada actividad evaluable, para que pondere en la calificación final . Si en la prueba de progreso se ha obtenido una nota igual o superior a 4 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. La nota media ponderada de todas la actividades deberá ser mayor o igual a 5 para aprobar la asignatura. La realización de las prácticas es obligatoria y no recuperable. Solo podrán ser evaluados aquellos alumnos que las hayan realizado. La evaluación si es recuperable.

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 4 sobre 10. La nota media ponderada de todas la actividades deberá ser mayor o igual a 5 para aprobar la asignatura. 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 la misma, obtener en las prácticas realizadas en el aula de ordenadores una nota mínima de 4 sobre 10.

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 Hèoltje	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	