

**FICHA IDENTIFICATIVA****Datos de la Asignatura**

<b>Código</b>	44006
<b>Nombre</b>	Bioquímica computacional
<b>Ciclo</b>	Máster
<b>Créditos ECTS</b>	5.0
<b>Curso académico</b>	2022 - 2023

**Titulación(es)**

<b>Titulación</b>	<b>Centro</b>	<b>Curso</b>	<b>Periodo</b>
2184 - M.U. en Química Teórica y Modelización Computacional 13-V.1	Facultad de Química	1	Anual

**Materias**

<b>Titulación</b>	<b>Materia</b>	<b>Caracter</b>
2184 - M.U. en Química Teórica y Modelización Computacional 13-V.1	5 - Optatividad	Optativa

**Coordinación**

<b>Nombre</b>	<b>Departamento</b>
SANCHEZ MARIN, JOSE	315 - Química Física
TUÑÓN GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO	315 - Química Física

**RESUMEN****CONOCIMIENTOS PREVIOS****Relación con otras asignaturas de la misma titulación**

No se han especificado restricciones de matrícula con otras asignaturas del plan de estudios.

**Otros tipos de requisitos**

No hay requisitos previos



## COMPETENCIAS

### 2184 - M.U. en Química Teórica y Modelización Computacional 13-V.1

- Que los/las estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.
- Que los/las estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios.
- Que los/las estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.
- Que los/las estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo
- Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.
- Los estudiantes deben ser capaces de fomentar, en contextos académicos y profesionales, el avance tecnológico y científico dentro de una sociedad basada en el conocimiento y en el respeto a: a) los derechos fundamentales y de igualdad de oportunidades entre hombres y mujeres, b) los principios de igualdad de oportunidades y accesibilidad universal de las personas con discapacidad y c) los valores propios de una cultura de paz y de valores democráticos.
- El estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales.
- El estudiante es organizado en el trabajo y sabe gestionar el tiempo.
- El estudiante posee capacidad de análisis y síntesis.
- El estudiante demuestra su conocimiento y comprensión de los hechos aplicando conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional.
- Adquirir una visión global de las distintas aplicaciones de la Química Teórica y modelización en campos de la Química, Bioquímica, Ciencias de Materiales, Astrofísica y Catálisis.
- Comprender los fundamentos teóricos y prácticos de técnicas con las que puede analizar la estructura electrónica, morfológica y estructural de un compuesto.
- Manejar las principales fuentes de información científica, siendo capaces de buscar información relevante en internet, de las bases de datos bibliográficas y de la lectura crítica de trabajos científicos.



## RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Conocer las principales características de la estructura de las moléculas biológicas y de las interacciones que la determinan. Comprender las bases teóricas de las principales técnicas utilizadas en la simulación de biomoléculas y ser capaces aplicar estas técnicas a casos sencillos. Reconocer las limitaciones de cada método de modelización y saber elegir el más adecuado para resolver un problema concreto.

## DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

### 1. Temas y sub-temas

1. Introducción. Biomoléculas y sus propiedades. Bases de datos estructurales de biomoléculas. Relación estructura-energía: Modelización de biomoléculas.
2. Superficies de energía potencial en biomoléculas. Mecánica Molecular. Campos de fuerzas de Mecánica Molecular. Exploración conformacional. Minimización: Coordenada de reacción. Métodos de Dinámica Molecular y Monte Carlo. Métodos de predicción de estructura.
3. Métodos avanzados de Dinámica Molecular. Dinámica Molecular ab-initio Born-Oppenheimer y métodos híbridos QM/MM. Técnicas de mejora del muestreo conformacional, cálculos de energía libre y Metadinámica. .
4. Modelos mixtos QM/MM. Inmersión electrostática y polarizable. Modelos continuos de solvatación. Extensión a estados excitados. .
5. Relaciones estructura-actividad. Descriptores moleculares. Relaciones cuantitativas estructura-actividad (QSAR).
6. Interacciones proteína-ligando. Técnicas de docking..



## VOLUMEN DE TRABAJO

ACTIVIDAD	Horas	% Presencial
Prácticas en laboratorio	20,00	100
Clases de teoría	20,00	100
Tutorías regladas	7,00	100
Elaboración de trabajos individuales	16,00	0
Estudio y trabajo autónomo	59,00	0
<b>TOTAL</b>	<b>122,00</b>	

## METODOLOGÍA DOCENTE

**Lección Magistral:** El profesor expondrá los contenidos del curso en sesiones presenciales de dos horas basándose en los materiales docentes publicados en la plataforma Moodle.

**Docencia en red.** Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma moodle (<http://www.uam.es/moodle>). Publicación de contenidos de la asignatura, herramientas de trabajo en grupo: foros de discusión y wiki, correo electrónico

**Clases en aula de informática.** La docencia se impartirá en un aula de informática. Las clases, en sesiones de dos horas, incluirán una introducción teórica breve, en la que el profesor o profesora expondrá los conceptos básicos, y aplicaciones prácticas, y una parte práctica, en la que el estudiante aprenderá a través de la resolución de casos prácticos.

**Tutorías.** El profesor realizará tutorías individuales o con grupos reducidos sobre cuestiones puntuales que los estudiantes puedan plantear.

**Informes o memorias escritas:** Orientación y supervisión en la preparación de informes o memorias escritas.

## EVALUACIÓN

**Convocatoria ordinaria**



El aprendizaje y la formación adquirida por el estudiante serán evaluados a lo largo de todo el curso, intentando que el estudiante avance de forma regular y constante en la asimilación de los contenidos de la asignatura.

La nota final de la asignatura se basará en los ejercicios, trabajos y discusión de los mismos que se irá realizando durante el curso. Dichos trabajos se puntuarán en base a los siguientes porcentajes:

- 10 % la asistencia y participación en clase,
- 90% realización y defensa de un caso práctico. Parte de este porcentaje podrá aplicarse a la realización de controles.

#### **Convocatoria extraordinaria**

Se realizará un examen final único que será de carácter teórico y práctico, y que abarcará los contenidos de toda la asignatura. La parte práctica constará de un trabajo individual que tiene que realizar el estudiante con los programas utilizados a lo largo del curso. La puntuación en la convocatoria extraordinaria se realizará en base a los siguientes porcentajes:

- 60 % el examen teórico,
- 40 % el examen práctico.

#### **Convocatoria extraordinaria**

Se realizará un examen final único que será de carácter teórico y práctico, y que abarcará los contenidos de toda la asignatura. La parte práctica constará de un trabajo individual que tiene que realizar el estudiante con los programas utilizados a lo largo del curso. La puntuación en la convocatoria extraordinaria se realizará en base a los siguientes porcentajes:



- 60 % el examen teórico,
- 40 % el examen práctico.

## REFERENCIAS

### Básicas

- Molecular Modeling and Simulation: An Interdisciplinary Guide  
Tamar Schlick  
Springer
- Understanding Molecular Simulation, Second Edition: From Algorithms to Applications  
Daan Frenkel  
Academic Press
- Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models  
Chris Cramer  
Wiley