|  |  |
| --- | --- |
|  | Máster Universitario en Biotecnología Facultad de CienciasE-mail: ciencias@uca.es |

Ficha de asignatura 2017-2018

|  |
| --- |
| **DATOS DE ASIGNATURA** |

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Código  | 270002 |  |  |
| Asignatura:  | Modelización molecular: aplicación a biomoléculas  | Créditos teóricos: 4 |  |
| Título:  | Máster en Biotecnología | Créditos prácticos: |  |
| Módulo | Común | Créditos ECTS totales: 4 |  |
| Materia | Aspectos transversales y metodológicos | Tipo: Obligatoria |  |
| Departamento | Ciencia de los Materiales e Ingeniería Metalúrgica y Química InorgánicaQuímica FísicaBiomedicina, Biotecnología y Salud Pública | Modalidad: PRESENCIAL |  |
| Semestre | 1º | Curso 1º |  |

**Requisitos previos y recomendaciones**

Requisitos previos

|  |
| --- |
|  |

Recomendaciones

|  |
| --- |
|  |

**Profesorado**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Nombre | Apellidos | Categoría | Coordinador |
| Manuel | García Basallote | Catedrático de Universidad | Sí |
| Jesús | Ayuso Vilacides | Catedrático de Escuela Universitaria | No |
| Carlos | Pendón Meléndez | Profesor Titular de Universidad | No |
| Mónica | Oliva Domínguez | Profesora Titular de Universidad (Profesora externa) | No |

**Competencias**

*(cumplimentar según Memoria del Máster)*

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Identificador | Competencia | Tipo |
| CB6 | *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* | Básica |
| CB9  | *Que los 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.* | Básica |
| CG2 | *Demostrar una buena capacidad de acceder por búsquedas electrónicas en bases de datos a la literatura científico-técnica* | General |
| CE1 | *Describir, cuantificar, analizar y evaluar de forma crítica los resultados experimentales obtenidos de forma autónoma, proponer hipótesis y ponerlas a prueba.* | Específica |
| CE3 | *Aplicar aspectos avanzados de la metodología analítica para la identificación y cuantificación biomolecular* | Específica |
| CE7 | *Analizar e interpretar los resultados obtenidos con el objeto de obtener conclusiones biotecnológicas relevantes a partir de los mismos* | Específica |
| CE11 | *Conocer los aspectos básicos de la modelización molecular y su aplicación a biomoléculas.* | Específica |
| CT1 | *Utilizar las Tecnologías de Información y Comunicación (TICs) como una herramienta para la expresión y la comunicación, para el acceso a fuentes de información, como medio de archivo de datos y documentos, para tareas de presentación, para el aprendizaje, la investigación y el trabajo cooperativo.* | Transversal |

**Resultados del aprendizaje**

|  |  |
| --- | --- |
| Identificador | Resultado |
| R1  | Aplicar los principios básicos de modelización molecular a estructuras moleculares de pequeño tamaño (sustrato, fármaco), mediano (polipéptidos, polinucleótidos) y otras biomoléculas de mayor tamaño (proteínas, ácidos nucleicos), así como analizar las posibles interacciones intermoleculares. |
| R2 | Interpretar los modelos tridimensionales generados por ordenador sobre las estructuras anteriores, así como predecir propiedades moleculares. |
| R3 | Utilizar métodos predictivos dirigidos a elucidar el plegamiento de cadenas polipeptídicas y proteínas. |
| R4 | Conocer los métodos comparativos de cadenas polipeptídicas. |
| R5 | Integrar los conocimientos de modelización molecular al análisis y/o diseño de procesos biotecnológicos. |

**Actividades formativas**

*(cumplimentar según Memoria del Máster)*

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Actividad formativa | Horas | Grupo | Detalle | Competencias a desarrollar |
| Clases teóricas | 12 | Único | Presencial | Todas |
| Clases prácticas sobre ejercicios de simulación con software específico | 18 | Único | Presencial | Todas |
| Trabajo no presencial | 34 |  | No presencial |  |
| Trabajo autónomo del estudiante | 34 |  | No presencial |  |
| Actividades de evaluación y autoevaluación | 2 | Único | Presencial | Todas |

Total de actividades formativas de docencia presencial: 32

Total de otras actividades: 68

Total de la asignatura: 100

**Sistema de evaluación**

Criterios generales de evaluación

|  |
| --- |
| La adquisición de competencias se valorará tanto a través de un examen final con cuestiones y problemas sobre los contenidos abordados en las distintas actividades formativas realizadas, como a través del seguimiento de las actividades realizadas, que incluirán la presentación de trabajos de manera oral (usando los medios audiovisuales que sean necesarios) y escrita.  |

Procedimientos de evaluación *(cumplimentar según Memoria del Máster)*

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Tarea/actividad | Medios, técnicas e instrumentos | Evaluador/es | Competencias a evaluar |
| Presentación de trabajos y actividades  |  | Profesores | Todas |
| Realización de examen final |  | Profesores | Todas |

Procedimiento de calificación *(cumplimentar según Memoria del Máster)*

|  |
| --- |
| Será obligatoria la realización de las tareas de Presentación de trabajos y otras actividades que se propongan. Para la calificación final en las distintas convocatorias se considerará la nota correspondiente a las actividades y presentación de trabajos (60%) y a la prueba escrita final (40%). Para superar la evaluación de la asignatura, se tendrá que obtener una puntuación superior a 3 sobre 10 en cada una de las partes. La calificación obtenida en las tareas de Presentación de trabajos y otras actividades tendrá validez hasta la convocatoria de septiembre del curso en que se hayan realizado.Aquellos alumnos que lo deseen podrán solicitar una evaluación global de la asignatura, en las convocatorias extraordinarias, de acuerdo al protocolo que tenga el centro. |

**Descripción de contenidos**

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Descripción de contenidos | Competencias relacionadas | Resultados del aprendizaje relacionados |
| Métodos para la determinación experimental de estructuras moleculares. Bases de datos estructurales. Programas para la visualización de estructuras tridimensionales.Métodos computacionales para la optimización de estructuras moleculares. Niveles de cálculo. Métodos DFT. Análisis conformacional. Utilización del programa Gaussian.Estudio termodinámico y cinético de las interacciones intermoleculares. Cálculo de superficies de energía potencial y estados de transición. Efecto del disolvente.Métodos computacionales para la predicción de propiedades moleculares (IR, Uv-Vis, CD)Estructura de las proteínas. Métodos predictivos de análisis de polipéptidos y proteínas: sitios de modificación, localización, estructuras secundarias, accesibilidad del disolvente, motivos y dominios funcionales. Predicción de estructuras de proteínas, visualización y evaluación de la estructura. Análisis de la similitud entre proteínas.Interacciones intermoleculares de las proteínas e interacciones proteína-acido nucléico. Modelos tipo ligando-receptor. Acoplamiento molecular (docking). Dinámica molecular.  | Todas | Todos |

**Bibliografía y fuentes electrónicas**

Bibliografía básica

|  |
| --- |
| Título: Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models, 2nd editionAutores: Christopher J. CramerEditorial: John Wiley & Sons, Ltd |
| Título: A Chemist's Guide to Density Functional Theory, 2nd editionAutores: Wolfram Koch, Max C. HolthausenEditorial: John Wiley & Sons, Ltd |
| Título: Autores:Editorial: |

Bibliografía específica

|  |
| --- |
| Foresman, J.B.; Frisch, Æ. Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods: A Guide to Using Gaussian, 2nd ed.; Gaussian, Inc. 1996. ISBN: 978-0963676931 |

Bibliografía ampliación

|  |
| --- |
|  |

**Comentarios/observaciones adicionales**

|  |
| --- |
|  |

**Mecanismos de control y seguimiento**

|  |
| --- |
|  |