

ASIGNATURA MODELIZACIÓN MOLECULAR: APLICACIÓN A BIOMOLÉCULAS

Código	270002
Titulación	MÁSTER EN BIOTECNOLOGÍA
Módulo	COMÚN
Materia	ASPECTOS TRANSVERSALES Y METODOLÓGICOS
Duración	ANUAL
Tipo	OBLIGATORIA
Idioma	CASTELLANO
ECTS	4
Teoría	0
Práctica	3,64
Departamento	C128 - CIENCIA DE LOS MATERIALES E ING. MET. Y

REQUISITOS Y RECOMENDACIONES

Requisitos

No procede

Recomendaciones

No procede

RESULTADO DEL APRENDIZAJE

Id.	Resultados
1	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.
2	Interpretar los modelos tridimensionales generados por ordenador sobre las estructuras anteriores, así como predecir propiedades moleculares.
3	Utilizar métodos predictivos dirigidos a elucidar el plegamiento de cadenas polipeptídicas y proteínas.
4	Conocer los métodos comparativos de cadenas polipeptídicas.
5	Integrar los conocimientos de modelización molecular al análisis y/o diseño de procesos biotecnológicos.

CONTENIDOS

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-ácido nucléico. Modelos tipo ligando-receptor. Acoplamiento molecular (docking). Dinámica molecular.

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.
- Los alumnos tendrán derecho a una prueba de evaluación global, en las dos convocatorias extraordinarias posteriores a la convocatoria ordinaria (la del cuatrimestre en el que se imparte). Esta modalidad de evaluación deberá ser solicitada en los plazos que el Centro determine. Los criterios de evaluación y tipo de pruebas a realizar serán determinados por el equipo docente de la asignatura. Aquellos alumnos que la soliciten serán informados con suficiente antelación.

Procedimiento de calificación

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.

Procedimientos de evaluación

Tarea/Actividades	Medios, técnicas e instrumentos
Presentación de trabajos y actividades	Programas informáticos empleados durante el desarrollo de la asignatura
Realización de examen final	Examen acerca de los conocimientos adquiridos

PROFESORADO

Profesorado	Categoría	Coordinador
GARCIA ALGARRA, ANDRES	PROFESOR AYUDANTE DOCTOR	Sí
AYUSO VILACIDES, JESUS	CATEDRÁTICO DE ESCUELA UNIVER.	No
PENDON MELENDEZ, CARLOS	PROFESOR TITULAR UNIVERSIDAD	No

ACTIVIDADES FORMATIVAS

Actividad	Horas	Detalle
02 Prácticas, seminarios y problemas	29,1	
10 Actividades formativas no presenciales	68	Trabajo no presencial - 34 horas Trabajo autónomo del estudiante - 34 horas
13 Otras actividades	2,9	Clases teóricas - 2.9 horas

BIBLIOGRAFÍA

Bibliografía básica

Ira N. Levine; Quantum Chemistry, 7th Edition; Pearson, 2014. ISBN-10: 0321803450 / ISBN-13: 9780321803450

Christopher J. Cramer; Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models, 2nd edition, John Wiley & Sons, 2004. ISBN: 978-0-470-09182-1

Wolfram Koch, Max C. Holthausen; A Chemist's Guide to Density Functional Theory, 2nd edition, John Wiley & Sons, 2001. ISBN: 9783527303724

Michael Gromiha; Protein Bioinformatics: From Sequence to Function, 1st Edition; Elsevier, 2010. ISBN: 9788131222973

Andreas D. Baxevanis, B. F. Francis Ouellette; Bioinformatics: A Practical Guide to the Analysis of Genes and Proteins, 2nd Edition; Wiley, 2004. ISBN: 978-0-471-46101-2

Bibliografía específica

Foresman, J.B.; Frisch, Æ. Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods: A Guide to Using Gaussian, 3rd ed.; Gaussian, Inc. Wallingford, CT, 2015. ISBN: 978-1-935522-03-4

COMENTARIOS

El Master en Biotecnología incorpora actividades en lengua inglesa, por lo que parte del material docente teórico y práctico se podrá suministrar en inglés.

MECANISMOS DE CONTROL

- Reuniones de coordinación del Master.
- Encuestas de satisfacción realizadas por la Unidad de Calidad de la Universidad de Cádiz

El presente documento es propiedad de la Universidad de Cádiz y forma parte de su Sistema de Gestión de Calidad Docente.

En aplicación de la Ley 3/2007, de 22 de marzo, para la igualdad efectiva de mujeres y hombres, así como la Ley 12/2007, de 26 de noviembre, para la promoción de la igualdad de género en Andalucía, toda alusión a personas o colectivos incluida en este documento estará haciendo referencia al género gramatical neutro, incluyendo por lo tanto la posibilidad de referirse tanto a mujeres como a hombres.
