



Any acadèmic	2014-15
Assignatura	11366 - Modelització Molecular de Biomolècules
Grup	Grup 1, 2S
Guia docent	A
Idioma	Català

Identificació de l'assignatura

Assignatura	11366 - Modelització Molecular de Biomolècules
Crèdits	1,44 de presencials (36 hores) 4,56 de no presencials (114 hores) 6 de totals (150 hores).
Grup	Grup 1, 2S (Campus Extens)
Període d'impartició	Segon semestre
Idioma d'impartició	Castellà

Professors

Professor/a	Horari d'atenció als alumnes					
	Hora d'inici	Hora de fi	Dia	Data d'inici	Data de fi	Despatx
Juan Frau Munar juan.frau@uib.es	15:30h	16:30h	Dilluns	22/09/2014	30/06/2015	qf 108
Joaquín Ortega Castro joaquin.castro@uib.es	12:00h	13:00h	Dimarts	09/02/2015	31/07/2015	QF-121

Contextualització

Professorat:

Juan Frau Munar. Catedràtic de Química Física membre del grup de Reactivitat Molecular i Disseny de Fàrmacs. La investigació que realitza està centrada en la aplicació de la teoria del funcional de la densitat i la dinàmica molecular a sistemes enzimàtics.

Assignatura:

La modelització molecular s'està mostrant com una eina molt eficaç per estudiar sistemes que no poden ser tractats experimentalment o bé com a complement de tècniques experimentals.

Al tractar sistemes biològics amb un nombre molt elevat d'àtoms necessitem fer ús dels principis bàsics de la mecànica molecular que condueixen a la descripció dels camps de força. Es comparan i analitzen diferents camps de força i els seus àmbits d'aplicació. Les tècniques de simulació, com és la dinàmica molecular i el mètode de Montecarlo, s'introdueixen com a eines bàsiques per realitzar anàlisis dinàmiques, anàlisis conformacionals, etc. Finalment, es presenta un mòdul d'introducció al disseny de fàrmacs. En resum, es tracta que els estudiants siguin capaços d'analitzar i saber quines eines tenen a l'abast per estudiar els sistemes biològics.

Requisits





Any acadèmic	2014-15
Assignatura	11366 - Modelització Molecular de Biomolècules
Grup	Grup 1, 2S
Guia docent	A
Idioma	Català

Competències

Específiques

- * No en té.

Genèriques

- * G1. Capacidad de abstracción, análisis y síntesis.
- * G2. Compromiso ético, con la calidad y con la preservación del medio ambiente.
- * G3. Habilidades para buscar, procesar y analizar información procedente de fuentes diversas.

Bàsiques

- * Podeu consultar les competències bàsiques que l'estudiant ha d'haver assolit en acabar el màster a l'adreça següent: http://estudis.uib.cat/master/comp_basiques/

Continguts

Continguts temàtics

1. Forces Intermoleculars
2. Mecànica Molecular
 - Bases de la Mecànica Molecular
 - Camps de força
3. Tècniques de Simulació
 - Dinàmica Molecular
 - MonteCarlo
4. Disseny de fàrmacs
 - Interaccions farmac-receptor
 - Modelització Molecular i Quimiinformàtica

Metodologia docent

La metodologia utilitzada es basa en dos punts principals: les classes expositives i l'aplicació d'aquests coneixements en el desenvolupament d'unes pràctiques computacionals.

Activitats de treball presencial



Any acadèmic	2014-15
Assignatura	11366 - Modelització Molecular de Biomolècules
Grup	Grup 1, 2S
Guia docent	A
Idioma	Català

Modalitat	Nom	Tip. agr.	Descripció	Hores
Classes teòriques	Classes de teoria	Grup gran (G)	El professorat amb l'ajut de presentacions power point desenvoluparà les parts més importants dels continguts recollits al programa de l'assignatura.	12
Classes pràctiques	Aplicacions pràctiques	Grup gran (G)	Realització de simulacions computacionals de problemes reals.	24

A començament del semestre hi haurà a disposició dels estudiants el cronograma de l'assignatura a través de la plataforma UIBdigital. Aquest cronograma inclourà almenys les dates en què es faran les proves d'avaluació contínua i les dates de lliurament dels treballs. A més, el professor o la professora informará els estudiants si el pla de treball de l'assignatura es durà a terme a través del cronograma o per una altra via, inclosa la plataforma Campus Extens.

Activitats de treball no presencial

Modalitat	Nom	Descripció	Hores
Estudi i treball autònom individual	Informe de pràctiques	Elaboració d'informe de les aplicacions pràctiques realitzades	114
Estudi i treball autònom individual	Preguntes breus	Realització de preguntes breus relacionades amb els continguts de l'assignatura	

Riscs específics i mesures de protecció

Les activitats d'aprenentatge d'aquesta assignatura no comporten riscos específics per a la seguretat i salut dels alumnes i, per tant, no cal adoptar mesures de protecció especials.

Avaluació de l'aprenentatge dels estudiants

Aplicacions pràctiques

Modalitat	Classes pràctiques
Tècnica	Tècniques d'observació (no recuperable)
Descripció	Realització de simulacions computacionals de problemes reals.
Críteris d'avaluació	
Percentatge de la qualificació final:	20%





Any acadèmic	2014-15
Assignatura	11366 - Modelització Molecular de Biomolècules
Grup	Grup 1, 2S
Guia docent	A
Idioma	Català

Informe de pràctiques

Modalitat	Estudi i treball autònom individual
Tècnica	Informes o memòries de pràctiques (no recuperable)
Descripció	Elaboració d'informe de les aplicacions pràctiques realitzades
Criteris d'avaluació	
Percentatge de la qualificació final:	50%

Preguntes breus

Modalitat	Estudi i treball autònom individual
Tècnica	Proves de resposta breu (no recuperable)
Descripció	Realització de preguntes breus relacionades amb els continguts de l'assignatura
Criteris d'avaluació	
Percentatge de la qualificació final:	30%

Recursos, bibliografia i documentació complementària

Bibliografia bàsica

Leach A.R. *Molecular Modelling. Principles and Applications (2nd edition)*, Addison Wesley Longman Limited, 2001
Gasteiger J. and Engel T., *Chemoinformatics*, Wiley, 2003
Mitland G.C., Rigby M., Smith E.B., Wakeham W.A., *Intermolecular Forces: their origin and determination (2nd edition)*, Clarendon Press, Oxford, 1987

Bibliografia complementària

Rapaport D.C., *The Art of Molecular Dynamics Simulations (2nd edition)*, Cambridge, 2004
Oprea T.I., *Chemoinformatics in Drug Discovery*, Wiley, 2004

Altres recursos

Manual del software a utilitzar
Artículos científicos seleccionados y relacionados con las actividades propuestas
Presentacions power point disponibles a Campus Extens