GUÍA DOCENTE

DENOMINACIÓN DE LA ASIGNATURA

Denominación: **ASPECTOS FISICO-QUÍMICOS DE INTERACCIONES EN BIOMOLÉCULAS**
Código: 101867
Plan de estudios: **GRADO DE BIOQUÍMICA** Curso: 4
Materia: ASPECTOS FÍSICO-QUÍMICOS DE INTERACCIONES EN BIOMOLÉCULAS
Carácter: OPTATIVA Duración: SEGUNDO CUATRIMESTRE
Créditos ECTS: 6.0 Horas de trabajo presencial: 60
Porcentaje de presencialidad: 40.0% Horas de trabajo no presencial: 90
Plataforma virtual: www.uco.es/moodle

DATOS DEL PROFESORADO

Nombre: PÉREZ MORALES, MARTA ROSEL (Coordinador)
Departamento: QUÍMICA FÍSICA Y TERMODINÁMICA APLICADA
Área: QUÍMICA FÍSICA
Ubicación del despacho: Edificio Marie Curie, planta 2ª
E-Mail: marta.perez@uco.es Teléfono: 957212423
URL web: http://www.uco.es/nanoestructuras/

REQUISITOS Y RECOMENDACIONES

Requisitos previos establecidos en el plan de estudios

El estudiante podrá matricularse de asignaturas optativas una vez que haya superados los 60 créditos de formación básica y, al menos, otros 60 créditos obligatorios.

Recomendaciones

Asistencia regular a las clases. Conocimiento básico de inglés para consultar la bibliografía y el manejo de herramientas informáticas. Disponer de ordenador portátil propio.

COMPETENCIAS

CB1	Capacidad de razonamiento crítico y autocrítico.
CB6	Saber reconocer y analizar un problema, identificando sus componentes esenciales, y planear una estrategia científica para resolverlo.
CB9	Saber comunicar información científica de manera clara y eficaz, incluyendo la capacidad de presentar un trabajo, de forma oral y escrita, a una audiencia profesional, y la de entender el lenguaje y propuestas de otros especialistas.
CE16	Conocer los principios y aplicaciones de los principales métodos experimentales e instrumentación utilizados en Bioquímica y Biología Molecular, con énfasis en las técnicas de aislamiento y caracterización de macromoléculas biológicas.
CE4	Comprender los principios que determinan la estructura de las macromoléculas biológicas (incluyendo proteínas y ácidos nucléicos), así como de los complejos supramoleculares biológicos, y ser capaz de explicar las relaciones entre la estructura y la funci.
CE8	Comprender las bases bioquímicas y moleculares del plegamiento, modificación postraduccional, tráfico intracelular, localización subcelular y recambio de las proteínas celulares.

GUÍA DOCENTE

OBJETIVOS

Al final del curso, los alumnos deberán haber adquirido los siguientes conocimientos:
- Las interacciones de las macromoléculas biológicas con otras moléculas de bajo peso molecular (ligandos) y la formulación termodinámica que describen estas interacciones en equilibrio.
- Los aspectos cinéticos de las interacciones mencionadas.
- Conocer y utilizar las herramientas bioinformáticas adecuadas para analizar información estructural de proteínas y de sus interacciones con ligandos.
- En el contexto de las interacciones ligando-proteína, conocer las técnicas actuales en el diseño de fármacos asistido por ordenador.
- Entender los cambios conformacionales que sufren las macromoléculas biológicas desde un punto de vista termodinámico.
- Aplicar determinadas técnicas espectroscópicas que permiten la caracterización de biopolímeros (Espectroscopías de absorción y emisión) a partir de casos prácticos en el laboratorio.
- Conocer otras técnicas clásicas de caracterización de biopolímeros basadas en procesos de transporte y sus aplicaciones: viscosidad, difusión, sedimentación y electroforesis.
- Conocer los métodos actuales para la cristalización de proteínas, así como las técnicas más comunes para la determinación de su estructura tridimensional a partir de los cristales.
- Conocer y utilizar herramientas informáticas para analizar y procesar los datos experimentales obtenidos en las prácticas de laboratorio.

CONTENIDOS

1. Contenidos teóricos

LECCION 1. TERMODINÁMICA DE LAS INTERACCIONES LIGANDO-MACROMOLÉCULA

Introducción. Macromoléculas con un único sitio de unión. Equilibrios entre ligandos. Macromoléculas con varios sitios de unión: Sitios iguales e independientes. Sitios diferentes e independientes. Interacción entre sitios y coeficiente de Hill. Acoplamiento de la unión de ligandos desde un punto de vista energético. Determinación experimental del equilibrio ligando-macromolécula.

LECCION 2. INTERACCIONES PROTEÍNA - PROTEÍNA

Introducción. Características de las interacciones proteína-proteína (PPIs). Clasificación de las PPIs. Interactoma y bases de datos de PPIs. Inhibidores de las PPIs.

LECCION 3. INTRODUCCIÓN A LOS MÉTODOS DE DOCKING. DISEÑO DE FÁRMACOS ASISTIDO POR ORDENADOR

Introducción. Aspectos energéticos del proceso de unión proteína-ligando. Métodos computacionales. Diseño de fármacos asistido por ordenador. *Docking* macromolecular.

LECCION 4. CAMBIOS CONFORMACIONALES EN BIOPOLÍMEROS

Introducción. Estabilidad conformacional y cambio. Mecanismo molecular de las transiciones. Tratamiento termodinámico de la transición conformacional. Influencia de la temperatura, pH y concentración salina en los cambios conformacionales. Modelo de plegamiento de dos estados. Intermedios en la desnaturalización de proteínas. Estudios cinéticos de desnaturalización de proteínas. Cambios conformacionales en el ADN.

LECCION 5. PROCESOS DE TRANSPORTE EN BIOMOLÉCULAS

Introducción. Dispersión de luz. Viscosidad. Difusión. Sedimentación. Electroforesis.

LECCION 6. CRISTALIZACIÓN Y DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL DE PROTEÍNAS

Introducción. Aspectos termodinámicos de la cristalización. Técnicas de cristalización de proteínas. Caracterización del cristal mediante técnicas de difracción. Problemas en la determinación de coordenadas. Otras técnicas de determinación estructural.

GUÍA DOCENTE

2. Contenidos prácticos

Laboratorio:
Práctica 1. Competencia entre ligandos en la unión a una proteína.
Práctica 2. Medida de la constante de unión de un ligando a una proteína mediante espectroscopía de absorción.
Práctica 3. Medida de la constante de unión de un ligando a una proteína mediante fluorescencia.
Práctica 4. Desnaturalización de proteínas en presencia de agentes químicos.

Aula de Informática:
Práctica de Aula 1. Introducción al MathCad: evaluación de las ecuaciones que rigen la interacción ligando-macromolécula.
Práctica de Aula 2. Interacciones proteína-proteína: visualización y análisis de las interfases de interacción. Organización de grupos de trabajo y búsqueda bibliográfica.
Práctica de Aula 3. Molecular docking: predicción de la estructura de complejos ligando-proteína.
Práctica de Aula 4. Análisis de las interacciones en la acción de fármacos sobre proteínas diana.

Seminarios:
Seminario 1: Exposición de trabajos.

METODOLOGÍA

Adaptaciones metodológicas para alumnado a tiempo parcial y estudiantes con discapacidad y necesidades educativas especiales

La metodología para los alumnos a tiempo parcial será la misma que para los alumnos a tiempo no parcial, si bien se facilitará para los primeros dicha metodología.

Actividades presenciales

Actividad	Grupo completo	Grupo mediano	Grupo pequeño	Total
Actividades de evaluación	3	-	-	3
Exposición grupal	-	3	-	3
Laboratorio	-	-	12	12
Lección magistral	30	-	-	30
Prácticas aplicaciones informáticas	-	12	-	12
Total horas:	***33***	***15***	***12***	***60***

Actividades no presenciales

Actividad	Total
Búsqueda de información	15
Consultas bibliográficas	15
Estudio	25

GUÍA DOCENTE

Actividad	Total
Memoria de prácticas	20
Trabajo de grupo	15
Total horas:	***90***

MATERIAL DE TRABAJO PARA EL ALUMNO

Aplicaciones informáticas
Manual de la asignatura - *http://www3.uco.es/moodle/*
Referencias Bibliográficas
Resumenes de los temas

Aclaraciones

Todo el material de trabajo se encontrará disponible en la plataforma Moodle.
Se emplearán aplicaciones web gratuitas y softwares de acceso libre, cuya forma de descargarlos será indicada en su momento por la profesora.

EVALUACIÓN

Competencias	Exposición oral	Informes/memorias de prácticas	Prácticas de laboratorio	Supuesto práctico/discusión caso clínico/discusión trabajo científico
CB1	X	X	X	X
CB6	X	X	X	X
CB9	X	X	X	X
CE16	X	X		X
CE4		X	X	X
CE8		X		
Total (100%)	***20%***	***20%***	***25%***	***35%***
Nota mínima (*)	***0***	***0***	***0***	***0***

(*)Nota mínima para aprobar la asignatura

GUÍA DOCENTE

Valora la asistencia en la calificación final:

No

Aclaraciones generales sobre los instrumentos de evaluación:

- Exposición por parejas de un artículo científico: 20% de la calificación total
- Memorias de las prácticas de aula de informática: 20% de la calificación total
- Memorias de las prácticas de laboratorio: 25% de la calificación total
- Resolución de cuestiones/problemas relacionados con el temario teórico: 35% de la calificación total

Todos los instrumentos de evaluación correponden a evaluación continua.

Aclaraciones sobre la evaluación para el alumnado a tiempo parcial y necesidades educativas especiales:

La evaluación para los alumnos a tiempo parcial será la misma que para los alumnos a tiempo no parcial, si bien puede considerarse la adaptación de los criterios de evaluación para casos concretos de alumnos a tiempo parcial.

Criterios de calificación para la obtención de Matrícula de Honor:

Según el artículo 30.3 del Reglamento de Régimen Académico

BIBLIOGRAFIA

1. Bibliografía básica

ALLEN, J.P., ***Biophysical Chemistry***, John Wiley & Sons 2008.

ATKINS, P.; DE PAULA, J. ***Química Física***, 8ª Edición, Editorial Médica Panamericana 2008.

CANTOR, C.R.; SCHIMMEL, P.R., ***Biophysical Chemistry (3 Vol.),*** W.H. Freeman and Co. 1980.

FREIFELDER, D. ***Physical Biochemistry. Applications to Biochemistry and Molecular Biology***, *W.H.* Freeman and Co. 1983.

HAMMES, G. G. ***Thermodynamics and Kinetics for the Biological Sciences***, 1ª Ed., John Wiley & Sons 2000.

HAMMES, G. G.; HAMMES-SCHIFFER, S. ***Physical Chemistry for the Biological Sciences (Methods of Biochemical Analysis)*** 2ª Ed., Wiley 2015.

YOUNG, D.; ***Computational Drug Design. A Guide for Computational and Medicinal Chemists***, 1ª Ed., John Wiley & Sons 2009.

2. Bibliografía complementaria

LASKOWSKI, W.; POHLIT, W., Biofísica, Ediciones Omega 1999.

BERGETHON, P.R.; SIMONS, E.R., Biophysical Chemistry. Molecules to Membranes, Springer-Verlag 1990.

SCHULTZ, G.E.; SCHIRMER, R.H., Principles of protein structure, Editorial Springer-Verlag 1979.

SILVERMAN, R.; HOLLADAY, M.W.; The Organic Chemistry of Drug Design and Drug Action, 3ª Ed., Academic Press 2014.

SHENG, C.; GEORG, G.I.; Targeting Protein-Protein Interactions by Small Molecules, Springer 2018.

Artículos científicos en revistas especializadas y direcciones web que se actualizan cada curso y se proporcionan con el material didáctico de cada tema concreto.

CRITERIOS DE COORDINACIÓN

Fecha de entrega de trabajos

GUÍA DOCENTE

CRONOGRAMA

Periodo	Actividades de evaluación	Exposición grupal	Laboratorio	Lección magistral	Prácticas aplicaciones informáticas
1ª Semana	0,0	0,0	0,0	2,0	0,0
2ª Semana	0,0	0,0	3,0	2,0	0,0
3ª Semana	0,0	0,0	3,0	2,0	0,0
4ª Semana	0,0	0,0	0,0	3,0	0,0
5ª Semana	0,0	0,0	0,0	2,0	3,0
6ª Semana	0,0	0,0	0,0	2,0	3,0
7ª Semana	0,0	0,0	0,0	2,0	0,0
8ª Semana	0,0	0,0	3,0	2,0	0,0
9ª Semana	0,0	0,0	3,0	2,0	0,0
10ª Semana	0,0	0,0	0,0	2,0	3,0
11ª Semana	0,0	0,0	0,0	2,0	3,0
12ª Semana	0,0	0,0	0,0	2,0	0,0
13ª Semana	0,0	3,0	0,0	2,0	0,0
14ª Semana	3,0	0,0	0,0	3,0	0,0
Total horas:	***3,0***	***3,0***	***12,0***	***30,0***	***12,0***

Las estrategias metodológicas y el sistema de evaluación contempladas en esta Guía Docente serán adaptadas de acuerdo a las necesidades presentadas por estudiantes con discapacidad y necesidades educativas especiales en los casos que se requieran.

PLAN DE CONTINGENCIA: ESCENARIO A

El escenario A, se corresponde con una menor actividad académica presencial en el aula como consecuencia de medidas sanitarias de distanciamiento interpersonal que limite el aforo permitido en las aulas.

METODOLOGÍA

Aclaraciones generales sobre la metodología en el escenario A

Se adoptará un sistema multimodal o híbrido de enseñanza que combine, en todo lo posible, las clases presenciales en aula y las clases presenciales por videoconferencia (sesiones síncronas) que se impartirán en el horario aprobado por el Centro. La distribución temporal de las actividades que se llevarán a cabo de forma presencial en aula y presencial por videoconferencia estará determinado por el Centro en función del aforo permitido en los espacios docentes y las medidas sanitarias de distanciamiento interpersonal que estén vigentes

GUÍA DOCENTE

en cada momento.
En caso de darse el escenario A, la metodología será la que se describe en esta guía docente, sin ningún cambio.

EVALUACIÓN

Competencias	Exposición oral	Informes/memorias de prácticas	Prácticas de laboratorio	Supuesto práctico/discusión caso clínico/discusión trabajo científico
CB1	X	X	X	X
CB6	X	X	X	X
CB9	X	X	X	X
CE16	X	X		X
CE4		X	X	X
CE8		X		
Total (100%)	***20%***	***20%***	***25%***	***35%***
Nota mínima (*)	***0***	***0***	***0***	***0***

(*)Nota mínima para aprobar la asignatura

Valora la asistencia en la calificación final (Escenario A):

No

Aclaraciones generales sobre los instrumentos de evaluación (Escenario A):

- Exposición por parejas de un artículo científico: 20% de la calificación total
- Memorias de las prácticas de aula de informática: 20% de la calificación total
- Memorias de las prácticas de laboratorio: 25% de la calificación total
- Resolución de cuestiones/problemas relacionados con el temario teórico: 35% de la calificación total

Todos los instrumentos de evaluación correponden a evaluación continua.
Instrumentos de evaluación y ponderación de la convocatoria extraordinaria del curso 20-21:
Para estudiantes de segunda matrícula o superior, los instrumentos de evaluación y ponderación de la convocatoria extraordinaria del curso 2020-2021 serán los mismos que para la convocatoria ordinaria 2019-20, y se conservarán aquellas calificaciones obtenidas por el estudiante en las pruebas de evaluación superadas en el curso 2019-20.

Aclaraciones sobre la evaluación para el alumnado a tiempo parcial y necesidades educativas especiales (Escenario A):

La evaluación para los alumnos a tiempo parcial y con necesidades educativas especiales será la misma que para los alumnos a tiempo no parcial, si bien puede considerarse la adaptación de los criterios de evaluación para casos concretos de alumnos.

GUÍA DOCENTE

Criterios de calificación para la obtención de Matrícula de Honor (Escenario A):

Según el artículo 30.3 del Reglamento de Régimen Académico

PLAN DE CONTINGENCIA: ESCENARIO B

El escenario B, contempla la suspensión de la actividad presencial en el aula como consecuencia de medidas sanitarias.

METODOLOGÍA

Aclaraciones generales sobre la metodología en el escenario B

La actividad docente presencial se llevará a cabo por videoconferencia (sesiones síncronas) en el horario aprobado por el Centro. Se propondrán actividades alternativas para los grupos reducidos que garanticen la adquisición de las competencias de esa asignatura.

En caso de darse el escenario B, las clases magistrales de teoría y las de prácticas en aula de informática se impartirían por videoconferencia síncronas en su totalidad con los mismos horarios y la misma distribución de grupos que en el caso del escenario A.

EVALUACIÓN

Competencias	Exposición oral	Informes/memorias de prácticas	Prácticas de laboratorio	Supuesto práctico/discusión caso clínico/discusión trabajo científico
CB1	X	X	X	X
CB6	X	X	X	X
CB9	X	X	X	X
CE16	X	X		X
CE4		X	X	X
CE8		X		
Total (100%)	***20%***	***20%***	***25%***	***35%***
Nota mínima (*)	***0***	***0***	***0***	***0***

(*)Nota mínima para aprobar la asignatura

Herramientas Moodle	Exposición oral	Informes/memorias de prácticas	Prácticas de laboratorio	Supuesto práctico/discusión caso clínico/discusión trabajo científico
Tarea		X	X	X
Videoconferencia	X			

GUÍA DOCENTE

Valora la asistencia en la calificación final (Escenario B):

No

Aclaraciones generales sobre los instrumentos de evaluación (Escenario B):

- Exposición por parejas de un artículo científico: 20% de la calificación total
- Memorias de las prácticas de aula de informática: 20% de la calificación total
- Memorias de las prácticas de laboratorio: 25% de la calificación total
- Resolución de cuestiones/problemas relacionados con el temario teórico: 35% de la calificación total

Todos los instrumentos de evaluación correponden a evaluación continua.

Instrumentos de evaluación y ponderación de la convocatoria extraordinaria del curso 20-21:
Para estudiantes de segunda matrícula o superior, los instrumentos de evaluación y ponderación de la convocatoria extraordinaria del curso 2020-2021 serán los mismos que para la convocatoria ordinaria 2019-20, y se conservarán aquellas calificaciones obtenidas por el estudiante en las pruebas de evaluación superadas en el curso 2019-20.

Aclaraciones sobre la evaluación para el alumnado a tiempo parcial y necesidades educativas especiales (Escenario B):

La evaluación para los alumnos a tiempo parcial y con necesidades educativas especiales será la misma que para los alumnos a tiempo no parcial, si bien puede considerarse la adaptación de los criterios de evaluación para casos concretos de alumnos.

Criterios de calificación para la obtención de Matrícula de Honor (Escenario B):

Según el artículo 30.3 del Reglamento de Régimen Académico