

## GUÍA DOCENTE

### DENOMINACIÓN DE LA ASIGNATURA

Denominación:	<b>ASPECTOS FÍSICO-QUÍMICOS DE INTERACCIONES EN BIOMOLÉCULAS</b>		
Código:	101867		
Plan de estudios:	<b>GRADO DE BIOQUÍMICA</b>	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:	<a href="https://moodle.uco.es/m2324/">https://moodle.uco.es/m2324/</a>		

### DATOS DEL PROFESORADO

Nombre:	PÉREZ MORALES, MARTA ROSEL (Coordinador)		
Departamento:	QUÍMICA FÍSICA Y TERMODINÁMICA APLICADA		
Área:	QUÍMICA FÍSICA		
Ubicación del despacho:	Edificio Marie Curie (C3), planta 2ª		
E-Mail:	<a href="mailto:marta.perez@uco.es">marta.perez@uco.es</a>	Teléfono: 957 212423	

### 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 nucleicos), así como de los complejos supramoleculares biológicos, y ser capaz de explicar las relaciones entre la estructura y la función.
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), con otras macromoléculas biológicas, y la formulación termodinámica que describen estas interacciones en equilibrio.
- Los aspectos termodinámicos y cinéticos que acompañan a la formación 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 computacionales actuales en el diseño de fármacos asistido por ordenador.
- Conocer las interacciones mediante las que se forman los complejos proteicos, las redes de interacciones entre proteínas, y la modulación (inhibición o estabilización) de estos complejos mediante otras moléculas (fármacos).
- Entender los cambios conformacionales que sufren las macromoléculas biológicas desde un punto de vista termodinámico.
- 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.
- Aplicar determinadas técnicas espectroscópicas que permiten la caracterización de biopolímeros (Espectroscopías de absorción y emisión) a partir de casos prácticos en el laboratorio.
- 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. INTRODUCCIÓN A LOS MÉTODOS DE DOCKING. DISEÑO DE FÁRMACOS ASISTIDO POR ORDENADOR**

Introducción. Aspectos energéticos del proceso de unión proteína-ligando. Métodos computacionales. *Docking* macromolecular. Diseño de fármacos asistido por ordenador. Métodos basados en la estructura del ligando (LBDD). Métodos basados en la estructura del target (SBDD). ¿Puede una molécula actuar como un fármaco? (Farmacocinética y farmacodinámica).

##### **LECCION 3. INTERACCIONES PROTEÍNA - PROTEÍNA**

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

##### **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. CRISTALIZACIÓN Y DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL DE PROTEÍNAS**

Introducción. Aspectos termodinámicos de la cristalización. Técnicas de cristalización de proteínas.



## GUÍA DOCENTE

Caracterización del cristal mediante técnicas de difracción. Problemas en la determinación de coordenadas. Otras técnicas de determinación estructural.

### LECCION 6. PROCESOS DE TRANSPORTE EN BIOMOLÉCULAS

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

#### 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 (1ª parte).

Práctica de Aula 2. Evaluación mediante MathCad de las ecuaciones que rigen la interacción ligando-macromolécula (2ª parte). Visualización mediante USCF Chimera de estructuras proteína-ligando y complejos proteína-proteína (análisis de las interfases de interacción).

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.

## OBJETIVOS DE DESARROLLO SOSTENIBLE RELACIONADOS CON LOS CONTENIDOS

Salud y bienestar

## METODOLOGÍA

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

En el caso de estudiantes a tiempo parcial, se facilitará la asistencia al grupo que mejor se adapte a sus necesidades.

En el caso de estudiantes con necesidades educativas especiales, la profesora se reunirá con los alumnos afectados para establecer las adaptaciones más adecuadas a cada caso particular, siguiendo las indicaciones del informe emitido por la Unidad de Educación Inclusiva.

### 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

## GUÍA DOCENTE

Actividad	Grupo completo	Grupo mediano	Grupo pequeño	Total
<b>Total horas:</b>	<b>33</b>	<b>15</b>	<b>12</b>	<b>60</b>

### Actividades no presenciales

Actividad	Total
Búsqueda de información	20
Consultas bibliográficas	15
Estudio	20
Memoria de prácticas	20
Trabajo de grupo	15
<b>Total horas:</b>	<b>90</b>

## MATERIAL DE TRABAJO PARA EL ALUMNO

Cuaderno de Prácticas - <https://moodle.uco.es/m2324/>

Presentaciones PowerPoint - <https://moodle.uco.es/m2324/>

Referencias Bibliográficas

Resúmenes de los temas - <https://moodle.uco.es/m2324/>

### 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, o a los que se tendrá acceso a través de la plataforma Citrix.

## EVALUACIÓN

Competencias	Exposición oral	Informes/memorias de prácticas	Prácticas de laboratorio	Resolución de problemas	Supuesto práctico/discusión caso clínico/discusión trabajo científico
CB1	X	X	X	X	X
CB6	X	X	X	X	X
CB9	X	X	X		X
CE16	X	X			X
CE4		X	X	X	X
CE8		X			
<b>Total (100%)</b>	<b>20%</b>	<b>10%</b>	<b>20%</b>	<b>20%</b>	<b>30%</b>
<b>Nota mínima (*)</b>	<b>0</b>	<b>0</b>	<b>0</b>	<b>0</b>	<b>0</b>

## GUÍA DOCENTE

(\*)Nota mínima (sobre 10) necesaria para que el método de evaluación sea considerado en la calificación final de la asignatura. En todo caso, la calificación final para aprobar la asignatura debe ser igual o superior a 5,0.

### 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: 10% de la calificación total
- Memorias de las prácticas de laboratorio: 20% de la calificación total
- Resolución de cuestiones/problemas relacionados con el temario teórico: 20% de la calificación total
- Desarrollo de un trabajo escrito a partir de un material proporcionado a cada estudiante por la profesora: 30% de la calificación total

Todos los instrumentos de evaluación corresponden a evaluación continua.

Se mantienen las notas de prácticas de laboratorio y de aula de informática para todas las convocatorias del curso.

Para estudiantes de segunda matrícula o superior, se conservarán aquellas calificaciones obtenidas por el estudiante en las pruebas de evaluación superadas en el curso 2022-23.

### 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.

El sistema de evaluación será adaptado de acuerdo a las necesidades presentadas por estudiantes con discapacidad y necesidades educativas especiales en los casos en se requiera, siguiendo las indicaciones del informe emitido por la Unidad de Educación Inclusiva.

### Aclaraciones sobre la evaluación de la convocatoria extraordinaria y convocatoria extraordinaria de finalización de estudios:

Para estudiantes de segunda matrícula o superior, los instrumentos de evaluación y ponderación de la convocatoria extraordinaria y convocatoria extraordinaria de finalización de estudios del curso 2023-2024 serán los mismos que para las convocatorias ordinarias, y se conservarán aquellas calificaciones obtenidas por el estudiante en las pruebas de evaluación superadas en el curso 2022-23.

### Criterios de calificación para la obtención de Matrícula de Honor:

Según el artículo 80.3 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.

## GUÍA DOCENTE

### 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

### Aclaraciones

La asignatura se imparte por una sola profesora, que tratará de coordinarse con los profesores del curso en la fecha de entrega de trabajos para distribuir la carga de trabajo del estudiante a lo largo del cuatrimestre.

## CRONOGRAMA

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

## GUÍA DOCENTE

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.