



DATOS IDENTIFICATIVOS

Modelización computacional de biomateriales

Asignatura	Modelización computacional de biomateriales			
Código	V11M188V01110			
Titulación	Máster Universitario en Nanociencia y Nanotecnología			
Descriptores	Creditos ECTS	Seleccione	Curso	Cuatrimestre
	3	OP	1	1c
Lengua	Castellano			
Impartición	Gallego Inglés			
Departamento	Dpto. Externo Química Física			
Coordinador/a	Pérez Juste, Ignacio Mandado Alonso, Marcos			
Profesorado	Hervés Beloso, Juan Pablo Mandado Alonso, Marcos Pérez Juste, Ignacio Renero Lecuna, Carlos			
Correo-e	mandado@uvigo.es uviqipj@uvigo.es			
Web	http://www.usc.gal/gl/estudios/masteres/ciencias-saude/master-universitario-nanociencia-nanotecnologia/20212022/mod-elizacion-computacional-biomateriais-17798-17030-3-99009			
Descripción general	(*Esta materia pretende que o alumno coñeza as posibilidades que ofrece os máis recentes métodos de modelización computacional, como ferramentas complementarias fundamentais no deseño racional de biomateriales de interese biolóxico ou biotecnolóxico (péptidos, proteínas, membranas, tensoactivos, etc.), así como na elucidación a nivel atómico do seu mecanismo de acción. Para iso estudaranse os principais métodos de modelado molecular e de simulación dinámica aplicado aos biomateriales, os algoritmos e aproximacións necesarias para realizar os devanditos estudos, así como os métodos de cálculo máis habituais na estimación da afinidade ligando- biomolécula, conformacións activas, etc. Coa materia preténdese tamén adquirir nocións básicas sobre cómo utilizar un supercomputador para levar a cabo simulacións computacionais de biomoléculas, así como saber utilizar algunhas das principais ferramentas computacionais para a simulación de biomateriales: motores de cómputo, paquetes de análises, visualizadores moleculares, campos de forza, servidores públicos para cálculos específicos, formatos de arquivos, etc.			

Resultados de Formación y Aprendizaje

Código

Resultados previstos en la materia

Resultados previstos en la materia

Resultados de
Formación y
Aprendizaje

Contenidos

Tema

TEMA 1. Introducción a las simulaciones computacionales de biomateriales. Evolución histórica y proyección.

TEMA 2. Principales métodos de modelado y simulación. Docking, Montecarlo y Dinámica Molecular.

TEMA 3. Campos de fuerza y niveles de resolución. Ventajas y limitaciones. Mapeos multiescala.

TEMA 4. Algoritmos y aproximaciones. Consideración de fuerzas de corto y largo alcance, baróstatos, termostatos, condiciones periódicas.

TEMA 5. Análisis: desviaciones y fluctuaciones, perfiles de densidad, coeficientes de difusión en 2 y 3 dimensiones, funciones de autocorrelación, funciones de distribución radial, etc.

TEMA 6. Métodos de cálculo de energías de Gibbs para diferentes procesos.

TEMA 7. Software y hardware: principales herramientas computacionales y cómo gestionar recursos de hardware. Motores de cómputo, paquetes de análisis y visualizadores.

TEMA 8. Casos prácticos: autoasociación de pequeñas moléculas, estudio de agregados supramoleculares, plegamiento-desplegamiento de macromoléculas, micelas y membranas.

Planificación

	Horas en clase	Horas fuera de clase	Horas totales
Lección magistral	6	12	18
Seminario	4	12	16
Prácticas de laboratorio	12	29	41
Examen de preguntas objetivas	0	0	0
Presentación	0	0	0

*Los datos que aparecen en la tabla de planificación son de carácter orientativo, considerando la heterogeneidad de alumnado

Metodologías

	Descripción
Lección magistral	Exposición por parte del profesor de los contenidos sobre la materia objeto de estudio, bases teóricas y/o directrices de un trabajo, ejercicio que el/la estudiante tiene que desarrollar
Seminario	Actividad enfocada al trabajo sobre un tema específico, que permite ahondar o complementar los contenidos de la materia. Se pueden emplear como complemento de las clases teóricas.
Prácticas de laboratorio	Actividades de aplicación de los conocimientos a situaciones concretas y de adquisición de habilidades básicas y procedimentales relacionadas con la materia objeto de estudio. Se desarrollan en espacios especiales con equipamiento especializado (laboratorios, aulas informáticas, etc).

Atención personalizada

Evaluación

Descripción	Calificación	Resultados de Formación y Aprendizaje
-------------	--------------	---------------------------------------

Seminario	La evaluación continua tendrá un peso del 50% en la calificación de la asignatura y constará de dos componentes: La participación activa en los seminarios y clases prácticas (30% de la calificación). Esta evaluación se llevará a cabo mediante la resolución de cuestiones y problemas planteados en clase, la presentación de trabajos y la intervención en los debates que puedan surgir. La puntuación máxima será de 3 puntos	30
Examen de preguntas objetivas	La evaluación de esta materia se hará mediante evaluación continua y la realización de un examen final. El examen final versará sobre contenidos básicos de la materia (50% de la calificación). El examen de la asignatura, que se realizará en la fecha indicada en la guía del curso correspondiente, consistirá en preguntas de respuesta corta y la resolución de problemas. La puntuación máxima será de 5 puntos. Se requiere una calificación mínima de 2 puntos en esta parte para que se computen las calificaciones de los otros dos ítems que se valoran.	50
Presentación	Presentaciones orales (20% de la calificación). Se evaluará la claridad expositiva y la capacidad para responder a las preguntas que se planteen. La puntuación máxima será de 2 puntos.	20

Otros comentarios sobre la Evaluación

Para la evaluación se podrán utilizar las plataformas Moodle (aula virtual) y MS Teams.

Fuentes de información

Bibliografía Básica

H.-D. Holje & G. Folkers, **Molecular Modeling: Basic Principles and Applications**, VCH, Weinheim, 2008

Herman J. C. Berendsen, **Simulating the Physical World: Hierarchical Modeling from Quantum Mechanics to Fluid Dynamics**, Cambridge University Press, 2007

GROMACS 5.0.7 User manual: <ftp://ftp.gromacs.org/pub/manual/manual-5.0.7.pdf>,

Amber 2020 Reference User manual. <https://ambermd.org/Manuals.php>,

Daan Frenkel, **Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications**, Computational Science Series, Vol 1, Academic Press, 2001

Michael P. Allen, Dominic J. Tildesley, **Computer Simulation of Liquids**, 2ª, OUP Oxford, 2017

Bibliografía Complementaria

Recomendaciones

Otros comentarios

El alumno debe evitar el simple esfuerzo memorístico y orientar el estudio a comprender, razonar y relacionar los contenidos de la materia. La participación en actividades interactivas permitirá al estudiante una mejor comprensión de los aspectos desarrollados en las clases expositivas, lo que facilitará la preparación del examen final.