



DATOS IDENTIFICATIVOS

Modelización computacional de biomateriais

Materia	Modelización computacional de biomateriais			
Código	V11M188V01110			
Titulación	Máster Universitario en Nanociencia e Nanotecnoloxía			
Descritores	Creditos ECTS 3	Sinale OP	Curso 1	Cuadrimestre 1c
Lingua de impartición	Castelán Galego 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 uviqpij@uvigo.es			
Web	http://www.usc.gal/gl/estudios/masteres/ciencias-saude/master-universitario-nanociencia-nanotecnoloxia/20212022/mod-elizacion-computacional-biomateriais-17798-17030-3-99009			
Descrición xeral	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 biomateriais 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 biomateriais, 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 biomateriais: motores de cómputo, paquetes de análises, visualizadores moleculares, campos de forza, servidores públicos para cálculos específicos, formatos de arquivos, etc.			

Resultados de Formación e Aprendizaxe

Código

Resultados previstos na materia

Resultados previstos na materia	Resultados de Formación e Aprendizaxe
---------------------------------	---------------------------------------

Contidos

Tema

TEMA 1. Introducción ás simulacións computacionais de biomateriales. Evolución histórica e proxección.

TEMA 2. Principais métodos de modelado e simulación. Docking, Montecarlo e Dinámica Molecular.

TEMA 3. Campos de forza e niveis de resolución. Vantaxes e limitacións. Mapeos multiescala.

TEMA 4. Algoritmos e aproximacións. Consideración de forzas de curto e longo alcance, baróstatos, termostatos, condicións periódicas.

TEMA 5. Análise: desviacións e fluctuacións, perfís de densidade, coeficientes de difusión en 2 e 3 dimensións, funcións de autocorrelación, funcións de distribución radial, etc.

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

TEMA 7. Software e hardware: principais ferramentas computacionais e como xestionar recursos de hardware. Motores de cómputo, paquetes de análises e visualizadores.

TEMA 8. Casos prácticos: autoasociación de pequenas moléculas, estudo de agregados supramoleculares, plegamiento- desplegamiento de macromoléculas, micelas e membranas.

Planificación			
	Horas na aula	Horas fóra da aula	Horas totais
Lección maxistral	6	12	18
Seminario	4	12	16
Prácticas de laboratorio	12	29	41
Exame de preguntas obxectivas	0	0	0
Presentación	0	0	0
*Os datos que aparecen na táboa de planificación son de carácter orientador, considerando a heteroxeneidade do alumnado.			

Metodoloxía docente	
	Descrición
Lección maxistral	Exposición por parte do profesor/a dos contidos sobre a materia obxecto de estudo, bases teóricas e/ou directrices dun traballo, exercicio que o/a estudante ten que desenvolver.
Seminario	Actividade enfocada ao traballo sobre un tema específico, que permite afondar ou complementar os contidos da materia. Pódese empregar como complemento das clases teóricas
Prácticas de laboratorio	Actividades de aplicación dos coñecementos a situacións concretas e de adquisición de habilidades básicas e procedementais relacionadas coa materia obxecto de estudo. Desenvólvense en espazos especiais con equipamento especializado (Laboratorios, aulas informáticas, etc...)

Atención personalizada

Avaliación			
	Descrición	Cualificación	Resultados de Formación e Aprendizaxe
Seminario	A participación activa nos seminarios e clases prácticas (30% da cualificación). Esta avaliación levará a cabo mediante a resolución de cuestións e problemas expostos en clase, a presentación de traballos e a intervención nos debates que poidan xurdir. A puntuación máxima será de 3 puntos.	30	

Exame de preguntas obxectivas	A avaliación desta materia farase mediante avaliación continua e a realización dun exame final. O exame final versará sobre contidos básicos da materia (50% da cualificación). O exame da materia, que se realizará na data indicada na guía do curso correspondente, consistirá en preguntas de resposta curta e a resolución de problemas. A puntuación máxima será de 5 puntos. Requírese unha cualificación mínima de 2 puntos nesta parte para que se computen as cualificacións dos outros dous ítems que se valoran.	50
Presentación	Presentacións orais (20% da cualificación). Avaliarase a claridade expositiva e a capacidade para responder as preguntas que se expoñan. A puntuación máxima será de 2 puntos.	20

Outros comentarios sobre a Avaliación

Para a avaliación poderanse utilizar as plataformas Moodle (aula virtual) e MS Teams.

Bibliografía. Fontes 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. Til, **Computer Simulation of Liquids**, 2ª, OUP Oxford, 2017

Bibliografía Complementaria

Recomendacións

Outros comentarios

O alumno debe evitar o simple esforzo memorístico e orientar o estudo para comprender, razoar e relacionar os contidos da materia. A participación en actividades interactivas permitirá ao estudante unha mellor comprensión dos aspectos desenvolvidos nas clases expositivas, o que facilitará a preparación do exame final.