

MODELIZACIÓN DE SISTEMAS QUÍMICOS Y DISEÑO DE ANÁLISIS BIOLÓGICOS

GUÍA DOCENTE CURSO 2019-20

Titulación:	Máster Universitario en Química y Biotecnología			760M
Asignatura:	Modelización de sistemas químicos y diseño de análisis biológicos			5113
Materia:	Modelización y Diseño			
Módulo:	Obligatorio			
Modalidad de enseñanza de la titulación:	Presencial	Carácter:	Obligatoria	
Curso:	1	Créditos ECTS:	4,00	Duración: Semestral (Primer Semestre)
Horas presenciales:	40,00		Horas estimadas de trabajo autónomo:	60,00
Idiomas en que se imparte la asignatura:	Español			
Idiomas del material de lectura o audiovisual:	Inglés, Español			

DEPARTAMENTOS RESPONSABLES DE LA DOCENCIA

MATEMÁTICAS Y COMPUTACIÓN				R111
Dirección:	C/ Madre de Dios, 53		Código postal:	26006
Localidad:	Logroño	Provincia:	La Rioja	
Teléfono:	941299452	Fax:	941299460	Correo electrónico: dpto.dmc@unirioja.es
QUÍMICA				R112
Dirección:	C/ Madre de Dios, 53		Código postal:	26006
Localidad:	Logroño	Provincia:	La Rioja	
Teléfono:	941299620	Fax:	941299621	Correo electrónico: dpto.dq@unirioja.es

PROFESORADO PREVISTO

Profesor:	Martínez Ruiz, Rodrigo		Responsable de la asignatura
Teléfono:	941299672	Correo electrónico:	rodrigo.martinez@unirioja.es
Despacho:	1103	Edificio:	CENTRO CIENTÍFICO TECNOLÓGICO Tutorías: Consultar
Profesor:	Sampedro Ruiz, Diego		
Teléfono:	941299647	Correo electrónico:	diego.sampedro@unirioja.es
Despacho:	1211	Edificio:	CENTRO CIENTÍFICO TECNOLÓGICO Tutorías: Consultar
Profesor:	San Juan Díaz, Juan Félix		
Teléfono:	941299440	Correo electrónico:	juanfelix.sanjuan@unirioja.es
Despacho:	3214	Edificio:	CENTRO CIENTÍFICO TECNOLÓGICO Tutorías: Consultar

DESCRIPCIÓN DE LOS CONTENIDOS

El contenido básico de la materia Modelización y Diseño es:

- Introducción a los sistemas operativos
- Visualización de moléculas y biomoléculas
- Uso y manipulación de la información en los campos de la Química y las Biociencias
- Diseño y análisis experimental en Biociencias: Bioinformática y Bioestadística

Computación aplicada a la Química y las Biociencias

REQUISITOS PREVIOS DE CONOCIMIENTOS Y COMPETENCIAS PARA PODER CURSAR CON ÉXITO LA ASIGNATURA

Recomendados para poder superar la asignatura.

Conocimientos generales sobre biología, química, estadística, software para cálculo científico y química computacional.

Asignaturas que proporcionan los conocimientos y competencias:

- Estadística y cálculo
- Química computacional aplicada
- Informática

CONTEXTO

La asignatura Modelización de Sistemas Químicos y Diseño de Análisis Biológicos tiene como objetivo que el alumno conozca y se familiarice con los sistemas operativos más importantes usados en la informática actual, así como que use algunos de los programas informáticos de visualización y manejo de moléculas y su aplicación a las biomoléculas.

COMPETENCIAS

Competencias generales

CG1 - Capacidad de análisis y síntesis a nivel avanzado en el ámbito de la Química y la Biotecnología.

CG2 - Capacidad de llevar a cabo proyectos de I+D+i relacionados con las materias propias del Máster.

CG3 - Habilidad para dar un uso avanzado a las herramientas de búsqueda de información relevante en el ámbito de la Química y la Biotecnología.

CG4 - Habilidad para comunicarse oralmente a nivel avanzado sobre temas de la Química y la Biotecnología, usando la terminología y técnicas aceptadas por los profesionales del sector.

CG5 - Habilidad para formular por escrito a nivel avanzado temas de la Química y de la Biotecnología usando correctamente diferentes tipos de enfoques académicos relacionados con su campo de estudio.

CG6 - Capacidad de iniciativa y autonomía para las distintas tareas propias de la actividad investigadora en el ámbito de las materias propias del Máster

Competencias específicas

CE2 - Modelar y diseñar de forma avanzada sistemas químicos y biológicos.

RESULTADOS DEL APRENDIZAJE

Los resultados de aprendizaje de la materia Modelización y Diseño se puede resumir en los siguientes puntos:

- Conocer y manejar los sistemas operativos más importantes usados en la informática actual
- Conocer el uso de los programas informáticos de visualización y manejo de moléculas y su aplicación a las biomoléculas
- Conocer el uso de las bases de datos científicas en el campo de la Química, la Biología y la Biotecnología
- Conocer y manejar los programas informáticos de cálculo científico aplicado a las Biociencias y a la Química

Ser capaz de diseñar experimentos y utilizar los paquetes estadísticos en problemas químicos y de las biociencias.

TEMARIO

Tema 1: Introducción a los sistemas operativos.

Sistemas operativos. Conceptos básicos sobre el sistema operativo Linux: sesión, usuarios, sistemas de ficheros y línea de comandos. Órdenes del sistema y programación de scripts en Linux.

Tema 2: Diseño y análisis experimental en biociencias: bioinformática y bioestadística.

Introducción al lenguaje de programación estadístico R. Programación avanzada y paquetes de R más usuales. Aplicación al análisis estadístico de datos experimentales.

Tema 3: Introducción al modelado molecular.

Métodos de cálculo: MM, QM, QM/MM. Cálculos de estructura, propiedades y reactividad.

Tema 4: Visualización e identificación de sitios activos

Generación de estructuras 3D y búsquedas conformacionales. Docking. Bases de datos de farmacóforos.

Tema 5: Diseño de medicamentos.

QSAR. Modificaciones estructurales de medicamentos. Modificaciones de mecanismos de acción de medicamentos.

BIBLIOGRAFÍA

Tipo:	Título
Básica	Gareth James, Daniela Witten, Trevor Hastie y Robert Tibshirani. An Introduction to Statistical Learning: with Applications in R. Springer Texts in Statistics, 2014. Absys
Básica	Pons, Nicolás. Linux : principios básicos del uso del sistema. Cornellà de Llobregat (Barcelona) : ENI, cop. 2009 Absys
Básica	Cramer, Christopher J. Essentials of computational chemistry : theories and models. John Wiley & Sons, 2003 Absys
Básica	Graham, Patrick, An introduction to medicinal chemistry, 3rd ed. Oxford University Press, 2005. Absys

Recursos en Internet

The R Project for Statistical Computing
<http://www.r-project.org/>

Sistema operativo Ubuntu
<http://www.ubuntu.com/>

METODOLOGÍA

Modalidades organizativas

Clases teóricas
 Seminarios y talleres
 Clases prácticas
 Estudio y trabajo en grupo
 Estudio y trabajo autónomo individual

Métodos de enseñanza

Método expositivo - Lección magistral
 Estudio de casos
 Resolución de ejercicios y problemas
 Aprendizaje basado en problemas
 Aprendizaje orientado a proyectos
 Aprendizaje cooperativo

ORGANIZACIÓN

Actividades presenciales	Tamaño de grupo	Horas
Clases teóricas	Grande	20,00
Seminarios y talleres	Grande	10,00
Clases prácticas	Informática	10,00
Total de horas presenciales		40,00
Trabajo autónomo del estudiante		Horas
Estudio y trabajo en grupo		-
Estudio y trabajo autónomo individual		-
Total de horas de trabajo autónomo		60,00
Total de horas		100,00

EVALUACIÓN

Sistemas de evaluación	Recuperable	No Recup.
Técnicas de observación		10%
Informes y memorias de prácticas		20%
Trabajos y proyectos	30%	
Pruebas escritas	40%	
Total		100%

Comentarios

El material didáctico se encontrará disponible en el aula virtual para todos los alumnos matriculados en esta asignatura. Para los estudiantes a tiempo parcial (reconocidos como tales por la Universidad), las actividades de evaluación no recuperable podrán ser sustituidas por otras, a especificar en cada caso. Esta posibilidad se habilitará siempre y cuando la causa que le impida la realización de la actividad de evaluación programada sea la que ha llevado al reconocimiento de la dedicación a tiempo parcial.

Criterios críticos para superar la asignatura

La nota de la asignatura se obtiene como suma de los diferentes porcentajes, siempre y cuando, el alumno consiga al menos un 40% del valor estipulado en cada apartado.