



Asignatura: Bioquímica Computacional  
Código: 32533  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Optativa  
Nº de créditos: 5 ECTS

## 1. ASIGNATURA / **COURSE TITLE**

Bioquímica Computacional / [Computational Biochemistry](#)

### 1.1. Código / **Course number**

32533

### 1.2. Materia / **Content area**

Módulo 3. Optatividad / [Module 3. Optional courses](#)

### 1.3. Tipo / **Course type**

Optativa / [Elective subject](#)

### 1.4. Nivel / **Course level**

Máster / [Master](#)

### 1.5. Curso / **Year**

1º / [1<sup>st</sup>](#)

### 1.6. Semestre / **Semester**

Anual / [Annual](#)

### 1.7. Número de créditos / **Credit allotment**

5 créditos ECTS / [5 ECTS credits](#)

### 1.8. Requisitos previos / **Prerequisites**

No hay requisitos previos / [There are no previous prerequisites](#)

### 1.9. Requisitos mínimos de asistencia a las sesiones presenciales / **Minimum attendance requirement**

La asistencia a las clases es obligatoria / [Attendance is mandatory](#)



Asignatura: Bioquímica Computacional  
Código: 32533  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Optativa  
Nº de créditos: 5 ECTS

## 1.10. Datos del equipo docente / Faculty data

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Jaime Rubio Martinez (Coordinador/**Coordinator**)  
Departamento de Química Física / **Department of Physical Chemistry**  
Facultad de Ciencias / **Faculty of Sciences**  
Universidad de Barcelona / **University of Barcelona**  
Despacho - Módulo / **Office - Module**:  
Teléfono / **Phone**: 934039263  
Correo electrónico/**Email**: jaime.rubio@ub.edu  
Página web/**Website**: <http://www.ub.edu/cadrugdesign/people/jaime/jaime.html>  
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Victor Guallar  
Departamento de Química / **Department of Chemistry**  
Centro de Supercomputación de Barcelona/ **Barcelona Supercomputing Center**  
Despacho - Módulo / **Office - Module**:  
Teléfono / **Phone**: 934137727  
Correo electrónico/**Email**: victor.guallar@bsc.es  
Página web/**Website**: <http://www.bsc.es/about-bsc/staff-directory/guallar-tasies-victor>  
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Carles Eduard Curutchet Barat  
Departamento de Farmacia y Tecnología Farmacéutica y Físicoquímica / **Department of Pharmacy and Pharmaceutical Technology and Physical Chemistry**  
Facultad de Farmacia y Ciencias de la Alimentación / **Faculty of Pharmacy and Food Sciences**  
Universidad de Barcelona/ **University of Barcelona**  
Despacho - Módulo / **Office - Module**:  
Teléfono / **Phone**: 934024557  
Correo electrónico/**Email**: carles.curutchet@ub.edu  
Página web/**Website**: <http://carlescurutchet.wordpress.com>  
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Rodrigo Casasnovas Perera  
Departamento de Química / **Department of Chemistry**  
Facultad de Ciencias / **Faculty of Sciences**  
Universidad de las Islas Baleares / **University of the Balearic Islands**  
Despacho - Módulo / **Office - Module**:  
Teléfono / **Phone**: 971173491  
Correo electrónico/**Email**: rodrigo.casasnovas@uib.es  
Página web/**Website**:  
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email



Asignatura: Bioquímica Computacional  
Código: 32533  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Optativa  
Nº de créditos: 5 ECTS

## 1.11. Objetivos del curso / Course objectives

### 1.11a. Resultados del aprendizaje

Conocer las principales características de la estructura de las moléculas biológicas y de las interacciones que la determinan. Comprender las bases teóricas de las principales técnicas utilizadas en la simulación de biomoléculas y ser capaces aplicar estas técnicas a casos sencillos. Reconocer las limitaciones de cada método de modelización y saber elegir el más adecuado para resolver un problema concreto.

### 1.11b. Competencias

Estos resultados del aprendizaje contribuyen a la adquisición de las siguientes competencias para el estudiante:

#### **BÁSICAS Y GENERALES**

CB6 - Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.

CB7 - Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.

CB8 - Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios.

CB9 - Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.

CB10 - Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.

CG01 - Los estudiantes son capaces de fomentar, en contextos académicos y profesionales, el avance tecnológico y científico dentro de una sociedad basada en el conocimiento y en el respeto a: a) los derechos fundamentales y de igualdad de oportunidades entre hombres y mujeres, b) los principios de igualdad de oportunidades y accesibilidad universal de las personas con discapacidad y c) los valores propios de una cultura de paz y de valores democráticos.



Asignatura: Bioquímica Computacional  
Código: 32533  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Optativa  
Nº de créditos: 5 ECTS

CG02 - Los estudiantes son capaces de resolver problemas y tomar decisiones de cualquier índole bajo el compromiso con la defensa y práctica de las políticas de igualdad.

#### **TRANSVERSALES**

CT01 - El/la estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales demostrando que responde al cambio con flexibilidad.

CT02 - El/la estudiante es organizado en el trabajo demostrando que sabe gestionar el tiempo y los recursos de que dispone.

CT03 - El/la estudiante posee capacidad de análisis y síntesis de tal forma que pueda comprender, interpretar y evaluar la información relevante asumiendo con responsabilidad su propio aprendizaje o, en el futuro, la identificación de salidas profesionales y yacimientos de empleo.

#### **ESPECÍFICAS**

CE01 - Los estudiantes demuestran su conocimiento y comprensión de los hechos aplicando conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional.

CE03 - Adquiere una visión global de las distintas aplicaciones de la Química Teórica y modelización en campos de la Química, Bioquímica, Ciencias de Materiales, Astrofísica y Catálisis.

CE04 - Comprende los fundamentos teóricos y prácticos de técnicas computacionales con las que puede analizar la estructura electrónica, morfológica y estructural de un compuesto e interpreta adecuadamente los resultados

CE05 - Manejar las principales fuentes de información científica relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional, siendo capaz de buscar información relevante en química en páginas web de datos estructurales, de datos experimentales químico físicos, en bases de datos de cálculos moleculares, en base de datos bibliográficas científicas y en la lectura crítica de trabajos científicos.

CE25 - Los estudiantes adquieren los conocimientos prácticos necesarios para llevar a cabo estudios en sistemas bioquímicos utilizando simulaciones computacionales.

#### **1.11a. Learning objectives**

To know the main structural features of biological molecules and the interactions that are at their origin. To understand the theoretical basis of the most used techniques for the simulation of biomolecules. To be able to apply these techniques to simple problems. To recognize the limitations of the studied techniques and to choose among them the most suitable for a given problem.



Asignatura: Bioquímica Computacional  
Código: 32533  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Optativa  
Nº de créditos: 5 ECTS

### 1.11b. Skills

These learning objectives contribute to provide the following skills for the students:

#### **BASIC AND GENERAL SKILLS**

CB6 - Students possess and understand knowledge that provides a basis or opportunity to be original in the development and/or application of ideas, often in a research context.

CB7 - Students know how to apply the acquired knowledge and their problem solving capacity in new or little known environments within broader (or multidisciplinary) contexts related to their area of study.

CB8 - Students are able to integrate knowledge and face the complexity of making judgments from information that, incomplete or limited, includes reflections on social and ethical responsibilities linked to the application of their knowledge and judgments.

CB9 - Students know how to communicate their conclusions and the knowledge and reasons that support them to specialized and non-specialized audiences in a clear and unambiguous way.

CB10 - Students possess the learning skills that allow them to continue studying in a way that will be self-directed or autonomous.

CG01 - Students are able to foster, in academic and professional contexts, technological and scientific progress within a society based on knowledge and respect for: a) fundamental rights and equal opportunities between men and women, b) The principles of equal opportunities and universal accessibility for persons with disabilities, and c) the values of a culture of peace and democratic values.

CG02 - Students are able to solve problems and make decisions of any kind under the commitment to the defense and practice of equality policies.

#### **CROSS-COMPREHENSIVE SKILLS**

CT01 - Students are able to adapt their selves to different cultural environments by demonstrating that they are able to respond to change with flexibility.

CT02 - Students are organized at work demonstrating that they know how to manage their time and resources.

CT03 - Students have the ability of analyze and synthesize in such a way that they can understand, interpret and evaluate the relevant information by assuming with responsibility their own learning or, in the future, the identification of professional exits and employment fields.



Asignatura: Bioquímica Computacional  
Código: 32533  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Optativa  
Nº de créditos: 5 ECTS

### SPECIFIC SKILLS

CE01- Students demonstrate their knowledge and understanding of the facts applying concepts, principles and theories related to the Theoretical Chemistry and Computational Modeling.

CE03 - Students acquire an overview of the different applications of the Theoretical Chemistry and modeling in the fields of Chemistry, Biochemistry, Materials Sciences, Astrophysics and Catalysis.

CE04 - Students understand the theoretical and practical bases of computational techniques with which they can analyze the electronic, morphological and structural structure of a compound and interpret the results adequately.

CE05 - Students have the ability to handle the main sources of scientific information related to Theoretical Chemistry and Computational Modeling. They are able to search for relevant information in web pages of structural data, physical chemical experimental data, databases of molecular calculations, databases of scientific bibliography and scientific works.

CE25 - Students acquire the practical knowledge necessary to carry out studies in biochemical systems using computer simulations.

## 1.12. Contenidos del programa / Course contents

1. Introducción. Biomoléculas y sus propiedades. Bases de datos estructurales de biomoléculas. Relación estructura-energía: Modelización de biomoléculas.
2. Superficies de energía potencial en biomoléculas. Mecánica Molecular. Campos de fuerzas de Mecánica Molecular. Exploración conformacional. Minimización: Coordenada de reacción. Métodos de Dinámica Molecular y Monte Carlo. Métodos de predicción de estructura.
3. Métodos avanzados de Dinámica Molecular. Dinámica Molecular ab-initio Born-Oppenheimer y métodos híbridos QM/MM. Técnicas de mejora del muestreo conformacional, cálculos de energía libre y Metadinámica. .
4. Modelos mixtos QM/MM. Inmersión electrostática y polarizable. Modelos continuos de solvatación. Extensión a estados excitados. .
5. Relaciones estructura-actividad. Descriptores moleculares. Relaciones cuantitativas estructura-actividad (QSAR).
6. Interacciones proteína-ligando. Técnicas de docking..



Asignatura: Bioquímica Computacional  
Código: 32533  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Optativa  
Nº de créditos: 5 ECTS

1. Introduction. Biomolecules and their properties. Structural databases of biomolecules. Structure-energy relationship: Biomolecules modeling.
2. Potential energy surfaces in biomolecules. Molecular mechanics force fields. Conformational exploration. Minimization: Reaction coordinate. Molecular Dynamics and Monte Carlo methods. Structure prediction methods. .
3. Advanced MD methods. Ab initio Born-Oppenheimer MD, hybrid QM/MM MD simulations. Enhanced sampling techniques, free energy simulations and Metadynamics .
4. Mixed QM/MM models. Electrostatic and polarizable embedding. Continuum solvation models. Extension to excited states .
5. Structure-activity relationships. Molecular descriptors. Quantitative structure-activity relationships (QSAR).
6. Protein-ligand interaction. Docking techniques..

### 1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

Molecular Modeling and Simulation: An Interdisciplinary Guide  
Tamar Schlick  
Springer

Understanding Molecular Simulation, Second Edition: From Algorithms to Applications  
Daan Frenkel  
Academic Press

Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models  
Chris Cramer  
Wiley

### 2. Métodos docentes / Teaching methodology

**Lección Magistral:** El profesor expondrá los contenidos del curso en sesiones presenciales de dos horas basándose en los materiales docentes publicados en la plataforma Moodle.

**Docencia en red.** Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma Moodle (<https://posgrado.uam.es>). Publicación de contenidos de la asignatura, herramientas de trabajo en grupo: foros de discusión y wiki, correo electrónico



Asignatura: Bioquímica Computacional  
 Código: 32533  
 Centro: Facultad de Ciencias  
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
 Nivel: Máster  
 Tipo: Formación Optativa  
 N° de créditos: 5 ECTS

**Clases en aula de informática.** La docencia se impartirá en un aula de informática. Las clases, en sesiones de tres horas, incluirán una introducción teórica breve, en la que el profesor o profesora expondrá los conceptos básicos, y aplicaciones prácticas, y una parte práctica, en la que el estudiante aprenderá a través de la resolución de casos prácticos.

**Tutorías.** El profesor realizará tutorías individuales o con grupos reducidos sobre cuestiones puntuales que los estudiantes puedan plantear.

**Informes o memorias escritas:** Orientación y supervisión en la preparación de informes o memorias escritas.

**Lecture:** The Professor will deliver lectures about the theoretical contents of the course during two-hour sessions. The presentations will be based on the different materials available at the Moodle platform.

**Network teaching:** All the tools available at the Moodle website (<https://posgrado.uam.es>) will be used (uploading of teaching materials, utilization of work team strategies, wiki, blogs, e-mail, etc.).

**Teaching in computer room.** Teaching will be conducted in a computer room. The classes, in sessions of three hours, will include a brief theoretical introduction, in which the teacher will present the basic concepts, followed by practical applications, in which the student will learn through the resolution of practical examples.

**Tutoring sessions:** The professor can organize either individual or group tutoring sessions about particular topics and questions raised by students.

**Written reports:** Orientation and supervision in the preparation of written reports.

### 3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

**Presencial:**

Clases teóricas en aula / aula virtual .....20 horas

Tutorías.....10 horas

Clases prácticas en aula virtual .....20 horas

**No Presencial:**

Elaboración de una memoria con resultados experimentales obtenidos en las prácticas.....16 horas

Estudio autónomo individual o en grupo.....59 horas

TOTAL (5 ECTS \* 25 horas/ECTS).....125 horas





Asignatura: Bioquímica Computacional  
Código: 32533  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Optativa  
Nº de créditos: 5 ECTS

**Contact hours:**

Theoretical lessons in classroom / virtual classroom .....20 hours

Tutoring.....10 hours

Practical lessons in virtual classroom .....20 hours

**Independent study hours:**

Elaboration of a memory based on the practical results.....16 hours

self-study or group study .....59 hours

TOTAL (5 ECTS \* 25 hours/ECTS).....125 hours

#### 4. Métodos de evaluación y porcentaje en la calificación final / Evaluation procedures and weight of components in the final grade

**Convocatoria ordinaria**

El aprendizaje y la formación adquirida por el estudiante serán evaluados a lo largo de todo el curso, intentando que el estudiante avance de forma regular y constante en la asimilación de los contenidos de la asignatura.

La nota final de la asignatura se basará en los ejercicios, trabajos y discusión de los mismos que se irá realizando durante el curso. Dichos trabajos se puntuarán en base a los siguientes porcentajes:

- 10 % la asistencia y participación en clase,
- 90% realización y defensa de un caso práctico. Parte de este porcentaje podrá aplicarse a la realización de controles.

**Convocatoria extraordinaria**

Se realizará un examen final único que será de carácter teórico y práctico, y que abarcará los contenidos de toda la asignatura. La parte práctica constará de un trabajo individual que tiene que realizar el estudiante con los programas utilizados a lo largo del curso. La puntuación en la convocatoria extraordinaria se realizará en base a los siguientes porcentajes:

- 60 % el examen teórico,
- 40 % el examen práctico.

**Ordinary assessment**

The knowledge acquired by the student will be evaluated along the course. The educational model to follow will emphasize a continuous effort and advance in training and learning.



Asignatura: Bioquímica Computacional  
Código: 32533  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Optativa  
Nº de créditos: 5 ECTS

The final student mark will be based on exercises that must be done during the course. The next criteria will be followed for assessment of student exercises:

- 10% attendance and participation in class,
- 90% practical case study. Part of this percentage may be applied to the performance of tests.

#### **Extraordinary assessment**

The student will have to face a final exam, including both theory and practical exercises. The student mark will be obtained from:

- 60% theoretical exam,
- 40% practical exam.

## **5. Cronograma\* / Course calendar**

Por favor, comprobar el horario oficial publicado en la página web del Máster.  
Please, check the official schedule posted on the master website.

\*Este cronograma tiene carácter orientativo

\*This course calendar is orientative