



PLAN DE ESTUDIOS (PE): Licenciatura en Física Aplicada

ÁREA: Biofísica

ASIGNATURA: Simulación Computacional de Biomoléculas

CÓDIGO:

CRÉDITOS: 5

FECHA: junio de 2017



1. DATOS GENERALES

Nivel Educativo:	Licenciatura
Nombre del Plan de Estudios:	Licenciatura en Física Aplicada
Modalidad Académica:	<i>Presencial</i>
Nombre de la Asignatura:	<i>Simulación Computacional de Biomoléculas</i>
Ubicación:	<i>Optativo</i>
Correlación:	
Asignaturas Precedentes:	<i>Matemáticas Básicas, Física Computacional</i>
Asignaturas Consecuentes:	

2. CARGA HORARIA DEL ESTUDIANTE

Concepto	Horas por semana		Total de horas por periodo	Total de créditos por periodo
	Teoría	Práctica		
Horas teoría y práctica <i>Actividades bajo la conducción del docente como clases teóricas, prácticas de laboratorio, talleres, cursos por internet, seminarios, etc.</i> (16 horas = 1 crédito)	36	36	72	5



3. REVISIONES Y ACTUALIZACIONES

Autores:	<i>Alexandra Deriabina, Eduardo Gonzalez, Valeri Poltev</i>
Fecha de diseño:	
Fecha de la última actualización:	<i>Junio de 2017</i>
Fecha de aprobación por parte de la academia de área, departamento u otro.	
Revisores:	<i>Alexandra Deriabina, Eduardo Gonzalez, Valeri Poltev</i>
Sinopsis de la revisión y/o actualización:	<i>Se ha actualizado ajustando los nuevos periodos de semestres de 18 semanas</i>

4. PERFIL DESEABLE DEL PROFESOR (A) PARA IMPARTIR LA ASIGNATURA:

Disciplina profesional:	<i>Física</i>
Nivel académico:	<i>Doctorado</i>
Experiencia docente:	<i>1 año</i>
Experiencia profesional:	<i>1 año</i>

5. PROPÓSITO: Proporcionar los conceptos, conocimientos y para el desarrollo de habilidades de programación para la resolución de problemas en Biofísica.

6. COMPETENCIAS PROFESIONALES:

- | |
|--|
| <ol style="list-style-type: none"> Hacer uso apropiado de la herramienta computacional para la solución de problemas en Biofísica. Aplicar lenguajes de programación para la obtención de resultados, así como en la presentación, escritura y análisis de los mismos. |
|--|

7. CONTENIDOS TEMÁTICOS



Unidad de Aprendizaje	Contenido Temático	Referencias
1. Representación gráfica y manipulación de los sistemas moleculares	1.1. Principales formatos de coordenadas de las moléculas biológicas. 1.2. Elaboración de programa para la conversión de los formatos. 1.3. Bancos de datos de estructuras experimentales de proteínas y ácidos nucleicos. 1.4. Algoritmos para identificación y evaluación de los parámetros estructurales (longitudes de enlace, ángulos de valencia, ángulos de torsión). 1.5. Elaboración del programa para cálculo de los parámetros estructurales de nucleótido.	Handbook of Computational Chemistry Jerzy Leszczynski Springer. 2012. Capítulo 17. H.M. Berman, et al.,(2000) The Protein Data Bank [SEP] Nucleic Acids Research, 28: 235-242.
2. Mecánica Molecular	2.1. Modelo de oscilador armónico aplicado para moléculas. Estiramiento de enlaces y cambios en el ángulo de valencia. 2.2. Potenciales periódicos para los ángulos de torsión. 2.3. Diferentes propuestas para la descripción de Interacciones de van der Waals. 2.4. Principales Campos de Fuerza de Mecánica Molecular. 2.5. Asignación de los tipos de átomos en el ejemplo de CF AMBER. 2.6. Identificación de los pares de átomos para cada término de CF. 2.7. Elaboración de programa para cálculo y comparación de las contribuciones de los términos enlazantes y no enlazantes en la energía total.	Handbook of Computational Chemistry Jerzy Leszczynski Springer. 2012. Capítulo 9. Ramachandran K.I. (2008). Computational Chemistry and Molecular Modeling. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg D.A. Case, et al (2016), AMBER 2016, University of California, San Francisco. Salomon-Ferrer, R., Case, D. A., & Walker, R. C. (2013). An overview of the Amber biomolecular simulation package: Amber biomolecular simulation package. Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science, 3(2), 198–210.
3. Optimización de las estructuras	3.1. Métodos de gradiente 3.1.1 Método Steepest Descent. 3.1.2 Método de Direcciones	Ramachandran K.I. (2008). Computational Chemistry and Molecular Modeling.



Unidad de Aprendizaje	Contenido Temático	Referencias
moleculares.	<p>conjugadas</p> <p>3.1.3 Método de gradiente conjugado.</p> <p>3.2. Las superficies de energía potencial.</p> <p>3.2.1 Criterios de convergencia</p> <p>3.2.2 Características de los puntos estacionarios.</p> <p>3.3. Elaboración del algoritmo para la búsqueda de un mínimo local basándose en uno de los métodos de gradiente.</p>	Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg

8. ESTRATEGIAS, TÉCNICAS Y RECURSOS DIDÁCTICOS

Estrategias y técnicas didácticas	Recursos didácticos
<ul style="list-style-type: none"> • <u>Lluvia o tormenta de ideas</u> • <u>Técnica de debate</u> • <u>Grupos de discusión</u> • <u>Solución de Problemas</u> • <u>Aprendizaje Basado en Problemas</u> • <u>Aprendizaje Basado en Proyectos</u> 	<ul style="list-style-type: none"> • <u>Impresos (textos): libros, fotocopias, periódicos, documentos...</u> • <u>Materiales audiovisuales</u> • <u>Páginas Web, Weblog, tours virtuales, webquest, correo electrónico, chats,</u>

9. EJES TRANSVERSALES

Eje (s) transversales	Contribución con la asignatura
Formación Humana y Social	
Desarrollo de Habilidades en el uso de las Tecnologías de la Información y la Comunicación	
Desarrollo de Habilidades del Pensamiento Complejo	
Lengua Extranjera	
Innovación y Talento Universitario	
Educación para la Investigación	



10. CRITERIOS DE EVALUACIÓN

Criterios	Porcentaje
▪ <u>Participación en clase</u>	20%
▪ <u>Tareas</u>	20%
▪ <u>Portafolio</u>	40%
▪ <u>Proyecto final</u>	20%
Total	100%

11. REQUISITOS DE ACREDITACIÓN

Estar inscrito como alumno en la Unidad Académica en la BUAP
Asistir como mínimo al 80% de las sesiones para tener derecho al examen por evaluación continua y/o presentar el examen final en ordinario o extraordinario
Asistir como mínimo al 50% de las sesiones para tener derecho al examen extraordinario
Cumplir con las actividades académicas y cargas de estudio asignadas que señale el PE