

DISEÑO ASISTIDO POR COMPUTADOR DE MOLECULAS BIOACTIVAS (MINOR SIMULACION MOLECULAR)

Nombre del Módulo DISEÑO ASISTIDO POR COMPUTADOR DE MOLECULAS BIOACTIVAS (MINOR SIMULACION MOLECULAR)

Número de Créditos Créditos STC-Chile: 5
Expresados en SCT - CHILE Número de horas totales: 135

Distribución de horas	Cátedra 3,00	Ayudantía 0,00	Práctica 0,00	Laboratorio 1,00	Presencial		Clínica 0,00	Terreno 0,00	Taller 0,00	Tarea 1,00	Autónomo	
					Seminario 0,00						Estudio 2,50	

Área de Conocimiento Ingeniería y Tecnología

Semestre 0

Requisitos Ingreso

Unidad Responsable de la Construcción del Syllabus INGENIERÍA CIVIL EN BIOINFORMÁTICA

Competencias del perfil de egreso al que contribuye este módulo y nivel de logro de cada una de ellas 08. Inferir las propiedades estructurales y las interacciones moleculares, a través de la química computacional, biología computacional y simulación molecular (+)

Aprendizajes

8.5.I Identifica las propiedades estructurales y farmacocinéticas que modulan la interacción de estructuras moleculares frente a receptores específicos.

8.5.D Reconoce herramientas computacionales utilizadas en el diseño de estructuras moleculares que modulan receptores involucrados en procesos químicos y biológicos.

8.6.I Propone cuestionamientos científicos y soluciones innovadoras a partir del uso de herramientas computacionales empleadas en el estudio de sistemas químicos y biológicos.

8.5.L Predice la asociación y el comportamiento dinámico de complejos macromoleculares utilizando herramientas de modelado y simulación molecular.

Unidades de aprendizajes y saberes esenciales

Unidad I

Actuar con meticulosidad en el reconocimiento de las propiedades que determinan las interacciones moleculares.

Reconocer la estructura y propiedades de las proteínas, como catalizadores bioquímicos y como receptores.
Distinguir las propiedades farmacodinámicas y farmacocinéticas de estructuras de interés químico medicinal.
Reconocer los diversos mecanismos de acción de las estructuras químicas para interactuar con las proteínas blanco.
Explicar el proceso de descubrimiento y desarrollo de fármacos y su relación con las herramientas computacionales actuales.

Unidad II

Demostrar juicio crítico en la búsqueda y aplicación de programas computacionales para el modelado de sistemas químicos y biológicos.
Reconocer las cantidades termodinámicas (energía libre de unión y sus componentes) que gobiernan la probabilidad de ocurrencia de la unión de una molécula bioactiva con su proteína blanco.
Estimar relaciones cuantitativas estructura-actividad (QSAR) y su impacto en el proceso de diseño de fármacos.
Reconocer las bases teóricas de los principales métodos computacionales usados en el diseño racional de fármacos asistido por computadores.
Analizar casos de aplicación exitosos del diseño asistido por computador de moléculas bioactivas en la Industria farmacéutica.

Unidad III

Desarrollar ingenio en la elaboración de preguntas y respuestas que pueden ser abordadas a través de herramientas computacionales.
Actuar con capacidad de análisis y metódicamente frente a la identificación de problemas en el diseño computacional de moléculas bioactivas.

Unidad IV

Manifestar rigurosidad en la caracterización de complejos moleculares.
Aplicar las técnicas computacionales de MM en el estudio de los complejos proteína- ligando.
Aplicar métodos de QM, métodos híbridos QM/MM y de energía libre de unión (MM-GBSA) a complejos proteína- ligando.
Analizar las magnitudes termodinámicas obtenidas a partir de los estudios computacionales de los complejos proteína-ligando.
Aplicar la técnica de acoplamiento molecular en la estimación de la interacción proteína-ligando.

Metodología a utilizar

Clases teóricas o cátedras

El propósito de este método es compartir conocimientos y activar procesos cognitivos. Se denomina como clase teórica una modalidad organizativa de la enseñanza en la que se utiliza principalmente como estrategia didáctica la exposición verbal por parte del profesor de los saberes que contempla el módulo. Aunque esta exposición se puede realizar de diversas formas y con distintos medios, la característica esencial de esta modalidad de enseñanza es su unidireccionalidad -hablar a los estudiantes- ya que tanto la selección de los saberes a exponer como la forma de hacerlo constituyen una decisión del profesor (De Miguel, 2005)

Práctica de laboratorio

Mediante el desarrollo de actividades experimentales se promoverá el trabajo grupal y/o individual según la actividad práctica respectiva. El trabajo de laboratorio permite a los estudiantes ejercitar los conocimientos (recursos cognitivos), habilidades (recursos procedimentales) y actitudes (recursos actitudinales) expuesto en las unidades de aprendizaje, y contribuir con la aplicación, por ejemplo, del método científico y la toma de decisiones basada en el mismo.

Aprendizaje basado en proyectos

La finalidad de este método es la realización de un proyecto para la resolución de un problema, aplicando habilidades y conocimientos adquiridos. Los estudiantes realizan un

proyecto en un tiempo determinado para resolver un problema, que tiene como resultado generar un servicio, crear un producto único, o abordar una tarea mediante la planificación, diseño y realización de una serie de actividades, en las cuales ellos deben aplicar los aprendizajes adquiridos y efectuar un uso efectivo de recursos. Mediante esta metodología, los estudiantes elaboran un producto tangible para la resolución de problemas enmarcados en un contexto específico. Los estudiantes planean, implementan y evalúan proyectos que tienen aplicación en el mundo real.

Exposición oral de estudiantes a sus pares

Esta metodología tiene como objetivo que los estudiantes desarrollen la capacidad para expresarse en público, de analizar casos clínicos, de contribuir al desarrollo del autoaprendizaje, de entender y analizar artículos científicos, entre otras. Para ello, se les motiva a preparar y presentar trabajos (tales como casos clínicos, reviews, papers, nuevas técnicas) en forma grupal o individual potenciando además sus habilidades de manejo de público mediante la dirección y gestión de la participación de sus compañeros (consultas y comentarios). De ser necesario el profesor realizará consultas y/o comentarios.

Investigación

Método cuya finalidad es conocer lo que nos rodea. Se define como un proceso sistemático, controlado, empírico y crítico, que consta de etapas claramente establecidas que obedecen a un marco metodológico de investigación. Esta estructura generalmente tiene como elementos constituyentes: Planteamiento del problema, elaboración del marco teórico, formulación de hipótesis, definición del método, análisis de datos y resultados, discusión y conclusión.

Evaluaciones de aprendizaje

- SIN ÁREA

Evaluaciones tipo pruebas escritas u orales:

- Prueba escrita 20%

Evaluación de contenidos Unidad I

- Prueba escrita 20%

Evaluación de contenidos Unidad II

Evaluaciones de desempeño escritas u orales:

- Presentación oral 10%

Exposición oral de 30 minutos en la que los alumnos (por medio de grupos) disertarán acerca de un tema asignado en clase (10%)

- Informe de taller 15%

Trabajo teórico-práctico en el que los alumnos (por medio de grupos) resolverán un problema computacional aplicado al diseño de moléculas y que será propuesto en clase (15%)

- Informe de proyecto 15%

Proyecto

- Presentación oral 20%

Exposición oral II

Sin Categoría:

- PRUEBA OPCIONAL ACUMULATIVA 30%

-

- PRUEBA RECUPERATIVA

Se puede recuperar una prueba parcial

Requerimientos especiales El módulo requiere como mínimo el 70% de asistencia a clases (cátedras, laboratorios, ayudantías).

* Se condiciona la aprobación del módulo a la entrega de cada uno de los talleres de cada unidad. Quien no entregase alguno de los talleres mencionados, estará en causal de reprobación.

* Los talleres y el Proyecto NO son recuperables.

Bibliografía

Nombre: Drug Design: Structure and ligand based approaches, **Tipo de soporte de bibliografía:** Libro Digital, **Tipo de bibliografía:** Básica, **Autor(es):** Kenneth M. Merz Jr et al, **Año:** 2010, **Editorial:** Cambridge University Press

Nombre: An introduction to medicinal chemistry, **Tipo de soporte de bibliografía:** Libro, **Tipo de bibliografía:** Básica, **Autor(es):** Patrick Graham, **Capítulos utilizados del Libro:** Todos, **Año:** 2009, **Editorial:** OUP
