

## **i ASIGNATURA MODELIZACIÓN MOLECULAR: APLICACIÓN A BIOMOLÉCULAS**

|                     |                                                |
|---------------------|------------------------------------------------|
| <b>Código</b>       | 270002                                         |
| <b>Titulación</b>   | MÁSTER UNIVERSITARIO EN BIOTECNOLOGÍA          |
| <b>Módulo</b>       | COMÚN                                          |
| <b>Materia</b>      | ASPECTOS TRANSVERSALES Y METODOLÓGICOS         |
| <b>Duración</b>     | PRIMER SEMESTRE                                |
| <b>Idioma</b>       | CASTELLANO                                     |
| <b>ECTS</b>         | 4.00                                           |
| <b>Departamento</b> | C128   CIENCIA DE LOS MATERIALES E ING. MET. Y |

## **✓ REQUISITOS Y RECOMENDACIONES**

### **Requisitos previos**

No procede

### **Recomendaciones**

No procede

|                                     |                                                                                                                                                                                      |                       |                     |                                                                                       |
|-------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------|---------------------|---------------------------------------------------------------------------------------|
| CSV (Código de Verificación Segura) | IVVH3QBIP5PT5W62QQ5QEL3RH4                                                                                                                                                           | Fecha                 | 03/09/2026 10:22:15 |  |
| Normativa                           | Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la ley 6/2020, de 11 de noviembre, reguladora de determinados aspectos de los servicios electrónicos de confianza | Validez del documento | Otros               |                                                                                       |
| Firmado por                         | UNIVERSIDAD DE CADIZ                                                                                                                                                                 |                       |                     |                                                                                       |
| Url de verificación                 | https://sede.uca.es/verifirma/code/IVVH3QBIP5PT5W62QQ5QEL3RH4                                                                                                                        | Página                | 1/9                 |                                                                                       |

## PROFESORADO

| Nombre        | Primer apellido | Segundo apellido | Categoría/<br>Empresa              | Coordinación |
|---------------|-----------------|------------------|------------------------------------|--------------|
| ANDRES        | GARCIA          | ALGARRA          | PROFESOR<br>AYUDANTE<br>DOCTOR     | Sí           |
| CARLOS        | PENDON          | MELENDEZ         | PROFESOR<br>TITULAR<br>UNIVERSIDAD | No           |
| JOSE<br>ANGEL | ALVAREZ         | SAURA            | PROFESOR<br>TITULAR<br>UNIVERSIDAD | No           |

## IDIOMAS

- **Oferta en lengua extranjera:** No

\* Exclusivo: sólo se imparte en ese idioma.

Adicional: un grupo adicional en ese idioma.

Mixto: un mismo grupo con el idioma base – español y el que se oferta.

|                                     |                                                                                                                                                                                      |                       |                     |                                                                                       |
|-------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------|---------------------|---------------------------------------------------------------------------------------|
| CSV (Código de Verificación Segura) | IVVH3QBIP5PT5W62QQ5QEL3RH4                                                                                                                                                           | Fecha                 | 03/09/2026 10:22:15 |  |
| Normativa                           | Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la ley 6/2020, de 11 de noviembre, reguladora de determinados aspectos de los servicios electrónicos de confianza | Validez del documento | Otros               |                                                                                       |
| Firmado por                         | UNIVERSIDAD DE CADIZ                                                                                                                                                                 |                       |                     |                                                                                       |
| Url de verificación                 | <a href="https://sede.uca.es/verifirma/code/IVVH3QBIP5PT5W62QQ5QEL3RH4">https://sede.uca.es/verifirma/code/IVVH3QBIP5PT5W62QQ5QEL3RH4</a>                                            | Página                | 2/9                 |                                                                                       |

## MOVILIDAD

- **Movilidad nacional (SICUE):** Sí
  - **Presencialidad:** Presencial
- **Movilidad internacional:** Sí
  - **Presencialidad:** Presencial
- **Estudiante visitante nacional:** Sí
  - **Número de plazas:** 2
  - **Presencialidad:** Presencial

## RESULTADOS DEL PROCESO DE FORMACIÓN Y APRENDIZAJE

| Competencia | Resultado formación y aprendizaje                                                                                                                                                                 |
|-------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| BÁSICA      | 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                         |
| BÁSICA      | 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. |
| ESPECÍFICA  | Aplicar aspectos avanzados de la metodología analítica para la identificación y cuantificación biomolecular                                                                                       |
| ESPECÍFICA  | Describir, cuantificar, analizar y evaluar de forma crítica los resultados experimentales obtenidos de forma autónoma, proponer hipótesis y ponerlas a prueba                                     |
| ESPECÍFICA  |                                                                                                                                                                                                   |

|                                     |                                                                                                                                                                                      |                       |                     |                                                                                       |
|-------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------|---------------------|---------------------------------------------------------------------------------------|
| CSV (Código de Verificación Segura) | IVVH3QBIP5PT5W62QQ5QEL3RH4                                                                                                                                                           | Fecha                 | 03/09/2026 10:22:15 |  |
| Normativa                           | Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la ley 6/2020, de 11 de noviembre, reguladora de determinados aspectos de los servicios electrónicos de confianza | Validez del documento | Otros               |                                                                                       |
| Firmado por                         | UNIVERSIDAD DE CADIZ                                                                                                                                                                 |                       |                     |                                                                                       |
| Url de verificación                 | https://sede.uca.es/verifirma/code/IVVH3QBIP5PT5W62QQ5QEL3RH4                                                                                                                        | Página                | 3/9                 |                                                                                       |

| Competencia | Resultado formación y aprendizaje                                                                                                                                                                                                                                                                          |
|-------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
|             | Analizar e interpretar los resultados obtenidos con el objeto de obtener conclusiones biotecnológicas relevantes a partir de los mismos.                                                                                                                                                                   |
| ESPECÍFICA  | Conocer los aspectos básicos de la modelización molecular y su aplicación a biomoléculas                                                                                                                                                                                                                   |
| GENERAL     | Demostrar una buena capacidad de acceder por búsquedas electrónicas en bases de datos a la literatura científico-técnica.                                                                                                                                                                                  |
| TRANSVERSAL | Utilizar las Tecnologías de Información y Comunicación (TICs) como una herramienta para la expresión y la comunicación, para el acceso a fuentes de información, como medio de archivo de datos y documentos, para tareas de presentación, para el aprendizaje, la investigación y el trabajo cooperativo. |

## RESULTADOS DE APRENDIZAJE

| ID/<br>Orden | Resultado                                                                                                                                                                                                                                                                                            |
|--------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 1            | Aplicar los principios básicos de modelización molecular a estructuras moleculares de pequeño tamaño (sustrato, fármaco), mediano (polipéptidos, polinucleótidos) y otras biomoléculas de mayor tamaño (proteínas, ácidos nucleicos), así como analizar las posibles interacciones intermoleculares. |
| 2            | Interpretar los modelos tridimensionales generados por ordenador sobre las estructuras anteriores, así como predecir propiedades moleculares.                                                                                                                                                        |
| 3            | Utilizar métodos predictivos dirigidos a elucidar el plegamiento de cadenas polipeptídicas y proteínas.                                                                                                                                                                                              |
| 4            | Conocer los métodos comparativos de cadenas polipeptídicas.                                                                                                                                                                                                                                          |

|                                     |                                                                                                                                                                                      |                       |                     |
|-------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------|---------------------|
| CSV (Código de Verificación Segura) | IVVH3QBIP5PT5W62QQ5QEL3RH4                                                                                                                                                           | Fecha                 | 03/09/2026 10:22:15 |
| Normativa                           | Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la ley 6/2020, de 11 de noviembre, reguladora de determinados aspectos de los servicios electrónicos de confianza | Validez del documento | Otros               |
| Firmado por                         | UNIVERSIDAD DE CADIZ                                                                                                                                                                 |                       |                     |
| Url de verificación                 | <a href="https://sede.uca.es/verifirma/code/IVVH3QBIP5PT5W62QQ5QEL3RH4">https://sede.uca.es/verifirma/code/IVVH3QBIP5PT5W62QQ5QEL3RH4</a>                                            | Página                | 4/9                 |



| ID/<br>Orden | Resultado |
|--------------|-----------|
|--------------|-----------|

|   |                                                                                                          |
|---|----------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 5 | Integrar los conocimientos de modelización molecular al análisis y/o diseño de procesos biotecnológicos. |
|---|----------------------------------------------------------------------------------------------------------|

## ACTIVIDADES Y METODOLOGÍAS DOCENTES

| Código | Descripción                            | Horas | Detalle                                                                        |
|--------|----------------------------------------|-------|--------------------------------------------------------------------------------|
| 01     | Teoría                                 | 16.00 |                                                                                |
| 03     | Prácticas de informática               | 16.00 |                                                                                |
| 10     | Actividades formativas no presenciales | 68.00 | Trabajo no presencial - 34 horas<br>Trabajo autónomo del estudiante - 34 horas |

## SISTEMA DE EVALUACIÓN

### Procedimientos de evaluación

| Tarea/Actividad                        | Medios, técnicas e instrumentos                                         | Ponderación |
|----------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------|-------------|
| Presentación de trabajos y actividades | Programas informáticos empleados durante el desarrollo de la asignatura | 60.00       |
| Realización de examen final            | Examen acerca de los conocimientos adquiridos                           | 40.00       |

## Criterios de evaluación

- La adquisición de competencias se valorará tanto a través de un examen teórico final (40%), como a través de actividades realizadas durante el curso, que incluirán la presentación de trabajos de manera oral (usando los medios audiovisuales que sean necesarios) y/o escrita. Salvo indicación expresa del profesorado, el uso de herramientas de Inteligencia Artificial Generativa (IAG) no estará permitido.
- La evaluación global consistirá en una prueba formada por una o varias actividades de las indicadas en el apartado segundo del artículo 2 del Reglamento UCA/CG03/2024, de 22 de abril. Con carácter general, el estudiantado podrá optar por solicitar la evaluación global de las mismas desde la primera convocatoria, presentando la correspondiente solicitud a través los medios habilitado por el Centro y en el plazo establecido para cada convocatoria. A través de las vías de difusión habituales, el Centro comunicará la apertura de solicitudes en cada convocatoria. Una vez realizada la solicitud de evaluación global para una convocatoria, el estudiante no podrá renunciar a la misma debiendo esperar a la siguiente convocatoria para presentarse a evaluación continua. En caso de que, habiéndolo solicitado, el alumno decidiese finalmente no presentarse a dicha evaluación, debe comunicárselo al profesorado responsable de la asignatura con 48 horas de antelación a la fecha de convocatoria a examen, salvo supuestos de causa mayor o sobrevenida debidamente justificada.
- Atendiendo a lo establecido en el artículo 11 del Reglamento de Evaluación, los estudiantes con alguna necesidad especial que quieran ejercer su derecho a adaptaciones en la evaluación, deberán solicitarlas al Servicio de Atención a la Discapacidad al inicio del semestre. Así, pues, quienes precisen de estas adaptaciones deberán hacer la solicitud de las mismas en las dos primeras semanas del calendario de clases de la asignatura, como máximo (a través de la dirección <https://cau->

|                                     |                                                                                                                                                                                      |                       |                     |
|-------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------|---------------------|
| CSV (Código de Verificación Segura) | IVVH3QBIP5PT5W62QQ5QEL3RH4                                                                                                                                                           | Fecha                 | 03/09/2026 10:22:15 |
| Normativa                           | Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la ley 6/2020, de 11 de noviembre, reguladora de determinados aspectos de los servicios electrónicos de confianza | Validez del documento | Otros               |
| Firmado por                         | UNIVERSIDAD DE CADIZ                                                                                                                                                                 |                       |                     |
| Url de verificación                 | <a href="https://sede.uca.es/verifirma/code/IVVH3QBIP5PT5W62QQ5QEL3RH4">https://sede.uca.es/verifirma/code/IVVH3QBIP5PT5W62QQ5QEL3RH4</a>                                            | Página                | 6/9                 |



diversidad.uca.es/cau/index.do ). Con posterioridad a ese plazo, solo se admitirán solicitudes por circunstancias sobrevenidas.

\* Sí: El alumnado repetidor deberá volver a realizar las prácticas.

No: El alumnado repetidor no deberá volver a realizar las prácticas.

Calificación: En función de la calificación obtenida en el curso anterior.

## TEMARIO

| Tema                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  | Descripción |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------|
| Métodos para la determinación experimental de estructuras moleculares. Bases de datos estructurales. Programas para la visualización de estructuras tridimensionales.                                                                                                                                                                                 |             |
| Métodos computacionales para la optimización de estructuras moleculares. Niveles de cálculo. Métodos DFT. Análisis conformacional. Utilización del programa Gaussian.                                                                                                                                                                                 |             |
| Estudio termodinámico y cinético de las interacciones intermoleculares. Cálculo de superficies de energía potencial y estados de transición. Efecto del disolvente.                                                                                                                                                                                   |             |
| Métodos computacionales para la predicción de propiedades moleculares (IR, Uv-Vis, CD).                                                                                                                                                                                                                                                               |             |
| Estructura de las proteínas. Métodos predictivos de análisis de polipéptidos y proteínas: sitios de modificación, localización, estructuras secundarias, accesibilidad del disolvente, motivos y dominios funcionales. Predicción de estructuras de proteínas, visualización y evaluación de la estructura. Análisis de la similitud entre proteínas. |             |
| Interacciones intermoleculares de las proteínas e interacciones proteína-ácido nucleico. Modelos tipo ligando-receptor. Acoplamiento molecular (docking). Dinámica molecular.                                                                                                                                                                         |             |

|                                     |                                                                                                                                                                                      |                       |                     |
|-------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------|---------------------|
| CSV (Código de Verificación Segura) | IVVH3QBIP5PT5W62QQ5QEL3RH4                                                                                                                                                           | Fecha                 | 03/09/2026 10:22:15 |
| Normativa                           | Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la ley 6/2020, de 11 de noviembre, reguladora de determinados aspectos de los servicios electrónicos de confianza | Validez del documento | Otros               |
| Firmado por                         | UNIVERSIDAD DE CADIZ                                                                                                                                                                 |                       |                     |
| Url de verificación                 | <a href="https://sede.uca.es/verifirma/code/IVVH3QBIP5PT5W62QQ5QEL3RH4">https://sede.uca.es/verifirma/code/IVVH3QBIP5PT5W62QQ5QEL3RH4</a>                                            | Página                | 7/9                 |



## BIBLIOGRAFÍA

### Bibliografía

#### Bibliografía Básica

Ira N. Levine; Quantum Chemistry, 7th Edition; Pearson, 2014. ISBN-10: 0321803450 / ISBN-13: 9780321803450

Christopher J. Cramer; Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models, 2nd edition, John Wiley & Sons, 2004. ISBN: 978-0-470-09182-1

Wolfram Koch, Max C. Holthausen; A Chemist's Guide to Density Functional Theory, 2nd edition, John Wiley & Sons, 2001. ISBN:9783527303724

Michael Gromiha; Protein Bioinformatics: From Sequence to Function, 1st Edition; Elsevier, 2010. ISBN: 9788131222973

Andreas D. Baxevanis, B. F. Francis Ouellette; Bioinformatics: A Practical Guide to the Analysis of Genes and Proteins, 2nd Edition; Wiley, 2004. ISBN: 978-0-471-46101-2

#### Bibliografía Específica

Foresman, J.B.; Frisch, . Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods: A Guide to Using Gaussian, 3rd ed.; Gaussian, Inc. Wallingford, CT, 2015. ISBN: 978-1-935522-03-4

|                                     |                                                                                                                                                                                      |                       |                     |
|-------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------|---------------------|
| CSV (Código de Verificación Segura) | IVVH3QBIP5PT5W62QQ5QEL3RH4                                                                                                                                                           | Fecha                 | 03/09/2026 10:22:15 |
| Normativa                           | Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la ley 6/2020, de 11 de noviembre, reguladora de determinados aspectos de los servicios electrónicos de confianza | Validez del documento | Otros               |
| Firmado por                         | UNIVERSIDAD DE CADIZ                                                                                                                                                                 |                       |                     |
| Url de verificación                 | <a href="https://sede.uca.es/verifirma/code/IVVH3QBIP5PT5W62QQ5QEL3RH4">https://sede.uca.es/verifirma/code/IVVH3QBIP5PT5W62QQ5QEL3RH4</a>                                            | Página                | 8/9                 |



## COMENTARIOS

### Comentarios/Observaciones adicionales

El Master en Biotecnología incorpora actividades en lengua inglesa, por lo que parte del material docente teórico y práctico se podrá suministrar en inglés.

El presente documento es propiedad de la Universidad de Cádiz y forma parte de su Sistema de Gestión de Calidad Docente.

En aplicación de la Ley 3/2007, de 22 de marzo, para la igualdad efectiva de mujeres y hombres, así como la Ley 12/2007, de 26 de noviembre, para la promoción de la igualdad de género en Andalucía, toda alusión a personas o colectivos incluida en este documento estará haciendo referencia al género gramatical neutro, incluyendo por lo tanto la posibilidad de referirse tanto a mujeres como a hombres.

|                                     |                                                                                                                                                                                      |                       |                     |
|-------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------|---------------------|
| CSV (Código de Verificación Segura) | IVVH3QBIP5PT5W62QQ5QEL3RH4                                                                                                                                                           | Fecha                 | 03/09/2026 10:22:15 |
| Normativa                           | Este documento incorpora firma electrónica reconocida de acuerdo a la ley 6/2020, de 11 de noviembre, reguladora de determinados aspectos de los servicios electrónicos de confianza | Validez del documento | Otros               |
| Firmado por                         | UNIVERSIDAD DE CADIZ                                                                                                                                                                 |                       |                     |
| Url de verificación                 | <a href="https://sede.uca.es/verifirma/code/IVVH3QBIP5PT5W62QQ5QEL3RH4">https://sede.uca.es/verifirma/code/IVVH3QBIP5PT5W62QQ5QEL3RH4</a>                                            | Página                | 9/9                 |

