Guía docente de la asignatura

Diseño Biocomputacional (M43/56/4/37)

Fecha de aprobación por la Comisión Académica: 04/07/2025

Máster	Máster Universitario en Ciencias y Tecnologías Químicas, Khemia
MÓDULO	Investigación y Desarrollo
RAMA	Ciencias
CENTRO RESPONSABLE DEL TÍTULO	Escuela Internacional de Posgrado

Semestre	Primero	**Créditos**	3	**Tipo**	Optativa	**Tipo de enseñanza**	Presencial

PRERREQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES

- Conocimientos básicos de química
- Conocimientos básicos de bioquímica, química biofísica y estructura de biomoléculas
- Conocimiento de inglés
- En el caso de utilizar herramientas de IA para el desarrollo de la asignatura, el estudiante debe adoptar un uso ético y responsable de las mismas. Se deben seguir las recomendaciones contenidas en el documento de "Recomendaciones para el uso de la inteligencia artificial en la UGR" publicado en esta ubicación: https://ceprud.ugr.es/formacion-tic/inteligencia-artificial/recomendaciones-ia#contenidoo

BREVE DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS (Según memoria de verificación del Máster)

- Homología de secuencias y análisis evolutivo.
- Estructura y estabilidad de las biomoléculas en relación al diseño de motivos estructurales.
- Predicción y modelado de la estructura de proteínas.
- Factores determinantes de las interacciones proteína-ligando y proteína-proteína.
- Diseño racional de proteínas y ligandos.
- Diseño semiautomático de proteínas.
- Simulación computacional de sistemas biomoleculares.
- Aplicaciones biotecnológicas y terapéuticas.

Firma (1): Universidad de Granada
CIF: Q1818002F

Firmado electrónicamente según arts. 15, 17 y 41.1 del Reglamento de Adm. Electrónica de la Universidad de Granada (BOJA nº 85 de 6 de mayo de 2021)
Este documento firmado digitalmente puede verificarse en https://sede.ugr.es/verifirma/
Código seguro de verificación (CSV): 4FEF55634CECF753DD3ECC07E9AAD17C
06/05/2026 - 11:01
Pág. 1 de 8

COMPETENCIAS

COMPETENCIAS BÁSICAS

- CB6 - Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en 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.

COMPETENCIAS GENERALES

- CG01 - Que los estudiantes sepan asumir las responsabilidades adecuadas en lo que respecta al desarrollo de conocimientos y/o prácticas profesionales

COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

- CE10 - Planificar, gestionar y desarrollar proyectos científico-tecnológicos con manejo de información y conocimiento de su transferencia hacia otros sectores.
- CE20 - Conocer los procedimientos generales para la determinación de estructuras de macromoléculas que intervienen en sistemas biológicos.
- CE21 - Conocer y manejar las principales herramientas computacionales de aplicación en Investigación Química.

COMPETENCIAS TRANSVERSALES

- CT02 - Capacidad de gestión del tiempo (referida a su organización y planificación)
- CT04 - Conocimiento y uso de las tecnologías de la información y comunicación (TICs) y de los recursos informáticos (programas, bases de datos, etc.) relativos al ámbito de estudio para adquirir, gestionar y comunicar la información
- CT06 - Trabajo en equipo
- CT07 - Sensibilidad hacia temas medioambientales

COMPETENCIAS

COMPETENCIAS BÁSICAS

- CB6 - Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser

Firma (1): Universidad de Granada
CIF: Q1818002F

Firmado electrónicamente según arts. 15, 17 y 41.1 del Reglamento de Adm. Electrónica de la Universidad de Granada (BOJA nº 85 de 6 de mayo de 2021)
Este documento firmado digitalmente puede verificarse en https://sede.ugr.es/verifirma/ 06/05/2026 - 11:01
Código seguro de verificación (CSV): 4FEF55634CECF753DD3ECC07E9AAD17C Pág. 2 de 8

originales en 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.

COMPETENCIAS GENERALES

- CG01 - Que los estudiantes sepan asumir las responsabilidades adecuadas en lo que respecta al desarrollo de conocimientos y/o prácticas profesionales

COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

- CE10 - Planificar, gestionar y desarrollar proyectos científico-tecnológicos con manejo de información y conocimiento de su transferencia hacia otros sectores.
- CE20 - Conocer los procedimientos generales para la determinación de estructuras de macromoléculas que intervienen en sistemas biológicos.
- CE21 - Conocer y manejar las principales herramientas computacionales de aplicación en Investigación Química.

COMPETENCIAS TRANSVERSALES

- CT02 - Capacidad de gestión del tiempo (referida a su organización y planificación)
- CT04 - Conocimiento y uso de las tecnologías de la información y comunicación (TICs) y de los recursos informáticos (programas, bases de datos, etc.) relativos al ámbito de estudio para adquirir, gestionar y comunicar la información
- CT06 - Trabajo en equipo
- CT07 - Sensibilidad hacia temas medioambientales

RESULTADOS DE APRENDIZAJE (Objetivos)

Al cursar esta materia el estudiante será capaz de:

- Conocer las bases de datos de secuencias y cómo extraer información de ellas.
- Conocer y manejar los principales algoritmos y programas para el estudio de homología de secuencias y análisis evolutivo. Conocer sus limitaciones y valorar su potencial en el campo de la biomedicina y el diseño de proteínas.
- Conocer las bases de datos de estructura de proteínas y ser capaz de extraer información.
- Ser capaz de utilizar los programas informáticos más comunes para la representación de la estructura de proteínas.

Firma (1): Universidad de Granada
CIF: Q1818002F

Firmado electrónicamente según arts. 15, 17 y 41.1 del Reglamento de Adm. Electrónica de la Universidad de Granada (BOJA nº 85 de 6 de mayo de 2021)
Este documento firmado digitalmente puede verificarse en https://sede.ugr.es/verifirma/ 06/05/2026 - 11:01
Código seguro de verificación (CSV): 4FEF55634CECF753DD3ECC07E9AAD17C Pág. 3 de 8

- Conocer las bases moleculares que determinan la estructura y estabilidad de una proteína así como los fundamentos del mecanismo de su plegamiento y equilibrio conformacional.
- Estar familiarizado con los métodos de predicción de estructura en proteínas.
- Conocer los métodos básicos de simulación molecular y utilizarlos para el estudio de proteínas.
- Conocer los métodos de predicción y análisis experimental de interacción proteína-ligando.
- Estar familiarizado con las principales aplicaciones biotecnológicas del diseño molecular de macromoléculas biológicas.

PROGRAMA DE CONTENIDOS TEÓRICOS Y PRÁCTICOS

TEÓRICO

Tema 1. Introducción al diseño biocomputacional

- Introducción al diseño biocomputacional
- Metodología de la Química Física Biológica
- Descriptiva de las macromoléculas biológicas y agregados supramacromoleculares

Tema 2. Estructura de biomoléculas I: fuerzas inter- e intramoleculares

- Las fuerzas inter- e intramoleculares como responsables de los niveles estructurales. Fuerzas covalentes y no covalentes. Interacciones iónicas. Interacciones de van der Waals. Interacciones por enlaces o puentes de hidrógeno. Interacción hidrofóbica. Impedimentos estéricos.
- Descripción estructural de proteínas, ácidos nucleicos y otros biopolímeros de interés. Estructura de proteínas: niveles estructurales. Estructura de ácidos nucleicos: niveles estructurales
- Balance de fuerzas en la estabilidad de biomoléculas y el papel del disolvente
- Funciones de energía para la simulación biocomputacional

Tema 3. Estructura de biomoléculas II: métodos experimentales

- Introducción a los métodos experimentales espectroscópicos
- Espectroscopia ultravioleta-visible
- Espectroscopia infrarroja
- Espectroscopia de fluorescencia
- Dicroísmo circular
- Espectroscopia de resonancia magnética nuclear
- Difracción de rayos X

Tema 4. Bases estructurales de las funciones de las macromoléculas biológicas

- Estabilidad de las macromoléculas biológicas. Definición de estado conformacional
- Relación estructura-función en biomoléculas
- Revisión general de las conformaciones de las proteínas. Clasificación estructural
- De la estructura a la función. Reconocimiento molecular y sitios activos

Tema 5. Análisis de secuencias y genomas

- Diseño biocomputacional y predicción estructural en la actualidad

Firma (1): Universidad de Granada
CIF: Q1818002F

Firmado electrónicamente según arts. 15, 17 y 41.1 del Reglamento de Adm. Electrónica de la Universidad de Granada (BOJA nº 85 de 6 de mayo de 2021)
Este documento firmado digitalmente puede verificarse en https://sede.ugr.es/verifirma/ 06/05/2026 - 11:01
Código seguro de verificación (CSV): 4FEF55634CECF753DD3ECC07E9AAD17C Pág. 4 de 8

- Secuenciación de ADN. Bases de datos de secuencias
- Conceptos y herramientas para el análisis y comparación de secuencias
- Diseño y predicción estructural basados en el análisis de secuencias. Diseño basado en secuencias consenso. Árboles filogenéticos. Análisis de coevolución

Tema 6. Predicción estructural de proteínas

- Elementos clave para la predicción estructural y el diseño biomolecular
- Predicción de estructura secundaria
- Predicción de estructura terciaria por comparación
- Predicción de estructura terciaria de novo
- Impacto de las técnicas de "deep learning" en la predicción estructural

Tema 7. Ingeniería y diseño de proteínas

- Revisión de las fuerzas no covalentes y de las pruebas experimentales más usuales en el diseño de proteínas
- Diseño de hélices alfa
- Diseño de láminas beta
- Principales metodologías para el diseño irracional de proteínas. Phage display. Yeast surface display. mRNA display. Ribosome display
- Estrategias del diseño biocomputacional
- Ejemplos de diseño de enzimas y funciones; de materiales proteicos; de mini-proteínas; de ensamblajes proteicos; de interruptores proteicos; de proteínas de membrana

PRÁCTICO

- Práctica 1.- Visualización de elementos estructurales en proteínas
- Práctica 2.- Alineamiento de secuencias
- Práctica 3.- Modelado por homología
- Práctica 4.- Estabilización de una proteína a partir de análisis de secuencias
- Práctica 5.- Diseño de hélices alfa

BIBLIOGRAFÍA

BIBLIOGRAFÍA FUNDAMENTAL

- “Introduction to Bioinformatics. Fourth edition”. Arthur M. Lesk (2014) Oxford University Press.
- “Bioinformatics. Sequence, structure and databanks”. Des Higgins, Willie Taylor (2000), Oxford University Press.
- “Protein bioinformatics. An algorithmic approach to sequence and structure analysis”; Ingvar Eidhammer, Inge Jonassen, William R. Taylor (2004) John Wiley and Sons.
- The Molecules of Life. Physical and Chemical Principles; J. Kuriyan, B. Konformi, D. Wmmer.
- Protein actions. Principles and modeling; I. Bahar, R.L. Jernigan, K.A. Dill. Garland Science.
- “The Organic Chemistry of Drug Design and Drug Action. Third Edition”. Richard B. Silverman, Mark. W. Hollaway. Academic Press, Elsevier.

Firma (1): Universidad de Granada
CIF: Q1818002F

Firmado electrónicamente según arts. 15, 17 y 41.1 del Reglamento de Adm. Electrónica de la Universidad de Granada (BOJA nº 85 de 6 de mayo de 2021)
Este documento firmado digitalmente puede verificarse en https://sede.ugr.es/verifirma/
Código seguro de verificación (CSV): 4FEF55634CECF753DD3ECC07E9AAD17C
06/05/2026 - 11:01
Pág. 5 de 8

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

- "Protein surface recognition. Approaches for drug discovery"; Ernest Giralt, Mark W. Peczuh, Xavier Salvatella (2011) John Wiley and Sons.
- "Estructura de proteínas", Carlos Gómez-Moreno Calera, Javier Sancho Sanz. (2003) Ariel Ciencia.
- "Biophysical Chemistry". Cantor and Schimmel. Freeman & Co.
- "Biophysical Chemistry". Klostermeier and Rudolph. CRC Press.
- "Physical Biochemistry". van Holde, Johnson and Ho. Prentice Hall.

ENLACES RECOMENDADOS

Plataforma PRADO de apoyo a la docencia: https://prado.ugr.es/

METODOLOGÍA DOCENTE

- MD01 Clases magistrales/expositivas. El equipo docente podrá utilizar para su desarrollo algunos de los siguientes métodos: sesión expositiva, aprendizaje basado en problemas, ejemplificación y estudio de casos.
- MD02 Clases de resolución de problemas. El equipo docente podrá utilizar algunos de los siguientes métodos para su desarrollo: Aprendizaje basado en problemas; ejemplificación y estudio de casos.
- MD03 Clases prácticas. El equipo docente podrá recurrir a métodos como estudio de casos, análisis diagnósticos, prácticas de laboratorio, aula de informática, visitas, búsqueda de datos, etc.
- MD04 Talleres, seminarios, debates, exposición (y/o defensa) de trabajos individuales o en grupo. El equipo docente podrá utilizar para su desarrollo algunos de los siguientes métodos: aprendizaje basado en problemas, ejemplificación y estudio de casos
- MD05 Tutorías: Programadas y de seguimiento (para trabajos de fin de Máster y Prácticas de Empresa), pudiéndose utilizar en las modalidades personalizada o en grupo, sincrónica (presenciales) o asincrónica (virtuales). La modalidad seleccionada por el equipo docente quedará recogida en la Guía Docente de cada materia
- MD07 Estudio y trabajo autónomo, individual y/o en grupo

EVALUACIÓN (instrumentos de evaluación, criterios de evaluación y porcentaje sobre la calificación final)

EVALUACIÓN ORDINARIA

El artículo 17 de la Normativa de Evaluación y Calificación de los Estudiantes de la Universidad de Granada establece que la convocatoria ordinaria estará basada preferentemente en la evaluación continua del estudiante, excepto para quienes se les haya reconocido el derecho a la evaluación única final.

Instrumentos de evaluación

- Pruebas escritas. Exámenes o pruebas breves a realizar a lo largo del curso basadas en la resolución de ejercicios, casos o problemas propuestos con anterioridad por el profesor.

Firma (1): Universidad de Granada
CIF: Q1818002F

Firmado electrónicamente según arts. 15, 17 y 41.1 del Reglamento de Adm. Electrónica de la Universidad de Granada (BOJA nº 85 de 6 de mayo de 2021)
Este documento firmado digitalmente puede verificarse en https://sede.ugr.es/verifirma/ 06/05/2026 - 11:01
Código seguro de verificación (CSV): 4FEF55634CECF753DD3ECC07E9AAD17C Pág. 6 de 8

Su **formato** (preguntas largas, cortas, pruebas respuesta múltiple, etc.) será seleccionado por el equipo docente encargado de impartir la materia. Su contenido y duración serán establecidos de acuerdo con la Normativa de Evaluación y Calificación aprobada por la UGR en Consejo de Gobierno de 20 de Mayo de 2013.

- Evaluación de asistencia y participación activa. Se basa en la valoración de actitudes e iniciativas de participación activa e interactiva en el desarrollo de la clase, en las tutorías, o en el grado de compromiso en el desarrollo de los trabajos planeados, en las prácticas de laboratorio, prácticas externas o cualquier otra tarea asignada, pudiéndose evaluar, si procede, la capacidad de trabajo en equipo. Se podrá optar por la utilización de listas de cotejo, rúbricas o instrumentos desarrollados por el equipo docente encargado de impartir la materia.
- Exposición de trabajos. El alumno desarrollará un trabajo, individual o en grupo, planteado y tutelado por el profesor y lo expondrá en una presentación breve ante el resto de la clase, sometiéndose a debate posterior con el resto de los alumnos y el profesor.
- Resolución de ejercicios o proyectos. Proyecto o ejercicio complejo que, el alumno o grupo de alumnos, deberá ir resolviendo por etapas a lo largo del curso. Cada etapa o hito alcanzado será evaluado y el alumno recibirá retroalimentación sobre su éxito o fracaso.
- Examen final. Este sistema de evaluación será aplicable únicamente para evaluar a alumnos que, de acuerdo con la Normativa de Evaluación y Calificación aprobada por la UGR en Consejo de Gobierno de 20 de Mayo de 2013, y durante los primeros quince días desde el comienzo de impartición de la materia elijan esta modalidad

Criterios de evaluación y porcentaje sobre la calificación final:

La evaluación será continua, con un seguimiento del esfuerzo del alumno y sus progresos a lo largo del curso. Los criterios evaluación se basarán en:

- La valoración del interés del alumno que se refleja principalmente en la asistencia regular a las clases y en la participación activa en las discusiones que se desarrollan en las mismas.
- El progreso del alumno en los conocimientos impartidos, que podrá valorarse de acuerdo con su capacidad de abordaje de los problemas y prácticas que se van proponiendo a medida que se desarrolla el curso.
- La corrección y calidad de los informes elaborados sobre las prácticas realizadas.
- La capacidad de discusión y defensa de los trabajos realizados en una sesión de evaluación oral individualizada con el profesor.

En la convocatoria ordinaria la calificación final será una media ponderada de:

- Examen escrito sobre los contenidos teóricos y prácticos de la asignatura (50%)
- Evaluación de asistencia y participación activa (15%)
- Informes de prácticas (20%)
- Resolución de ejercicios o proyectos (10%)
- Exposición de trabajos (5%)

Se entregarán informes individuales por escrito para evaluar el temario de prácticas, los ejercicios, proyectos y trabajos. La nota final será una media ponderada del examen escrito (50%), de la asistencia y participación en clase (15%), de los informes de prácticas (20%), de los ejercicios o proyectos (10%) y de los trabajos (5%). No hay que alcanzar nota mínima en ninguna de las partes. Para superar la asignatura será necesario obtener una calificación final igual o mayor que cinco.

Firma (1): Universidad de Granada
CIF: Q1818002F

Firmado electrónicamente según arts. 15, 17 y 41.1 del Reglamento de Adm. Electrónica de la Universidad de Granada (BOJA nº 85 de 6 de mayo de 2021)
Este documento firmado digitalmente puede verificarse en https://sede.ugr.es/verifirma/
Código seguro de verificación (CSV): 4FEF55634CECF753DD3ECC07E9AAD17C
06/05/2026 - 11:01
Pág. 7 de 8

EVALUACIÓN EXTRAORDINARIA

El artículo 19 de la Normativa de Evaluación y Calificación de los Estudiantes de la Universidad de Granada establece que los estudiantes que no hayan superado la asignatura en la convocatoria ordinaria dispondrán de una convocatoria extraordinaria. A ella podrán concurrir todos los estudiantes, con independencia de haber seguido o no un proceso de evaluación continua. De esta forma, el estudiante que no haya realizado la evaluación continua tendrá la posibilidad de obtener el 100% de la calificación mediante la realización de una prueba y/o trabajo.

La evaluación en convocatoria extraordinaria se llevará a cabo en un único acto académico el día de la convocatoria oficial de examen para la asignatura mediante un examen escrito que incluirá preguntas tanto del temario teórico (50% de la nota) como práctico (50% de la nota), que garanticen que el alumno ha adquirido la totalidad de las competencias descritas en la presente guía docente. En el caso de la parte práctica, estas preguntas podrán incluir la realización de supuestos prácticos manejando el software y las bases de datos utilizados a lo largo del curso.

EVALUACIÓN ÚNICA FINAL

El artículo 8 de la Normativa de Evaluación y Calificación de los Estudiantes de la Universidad de Granada establece que podrán acogerse a la evaluación única final, el estudiante que no pueda cumplir con el método de evaluación continua por causas justificadas.

Para acogerse a la evaluación única final, el estudiante, en las dos primeras semanas de impartición de la asignatura o en las dos semanas siguientes a su matriculación si ésta se ha producido con posterioridad al inicio de las clases o por causa sobrevenidas. Lo solicitará, a través del procedimiento electrónico, a la Coordinación del Máster, quien dará traslado al profesorado correspondiente, alegando y acreditando las razones que le asisten para no poder seguir el sistema de evaluación continua.

La evaluación en tal caso consistirá en un único acto académico el día de la convocatoria oficial de examen para la asignatura mediante un examen escrito que incluirá preguntas tanto del temario teórico (50% de la nota) como práctico (50% de la nota), que garanticen que el alumno ha adquirido la totalidad de las competencias descritas en la presente guía docente. En el caso de la parte práctica, estas preguntas podrán incluir la realización de supuestos prácticos manejando el software y las bases de datos utilizados a lo largo del curso.

INFORMACIÓN ADICIONAL

Información de interés para estudiantado con discapacidad y/o Necesidades Específicas de Apoyo Educativo (NEAE): Gestión de servicios y apoyos (https://ve.ugr.es/servicios/atencion-social/estudiantes-con-discapacidad).

Firma (1): Universidad de Granada
CIF: Q1818002F

Firmado electrónicamente según arts. 15, 17 y 41.1 del Reglamento de Adm. Electrónica de la Universidad de Granada (BOJA nº 85 de 6 de mayo de 2021)
Este documento firmado digitalmente puede verificarse en https://sede.ugr.es/verifirma/
Código seguro de verificación (CSV): 4FEF55634CECF753DD3ECC07E9AAD17C
06/05/2026 - 11:01
Pág. 8 de 8