



UNIVERSIDAD DE CÓRDOBA

FACULTAD DE CIENCIAS  
**GRADO DE BIOQUÍMICA**

CURSO 2024/25

**ASPECTOS FÍSICO-QUÍMICOS DE  
INTERACCIONES EN BIOMOLÉCULAS****Datos de la asignatura**

---

**Denominación:** ASPECTOS FÍSICO-QUÍMICOS DE INTERACCIONES EN BIOMOLÉCULAS**Código:** 101867**Plan de estudios:** GRADO DE BIOQUÍMICA**Curso:** 4**Materia:** ASPECTOS FÍSICO-QUÍMICOS DE INTERACCIONES EN BIOMOLÉCULAS**Carácter:** OPTATIVA**Duración:** SEGUNDO CUATRIMESTRE**Créditos ECTS:** 6.0**Horas de trabajo presencial:** 60**Porcentaje de presencialidad:** 40.0%**Horas de trabajo no presencial:** 90**Plataforma virtual:** <https://moodle.uco.es/>**Profesor coordinador**

---

**Nombre:** PÉREZ MORALES, MARTA ROSEL**Departamento:** QUÍMICA FÍSICA Y TERMODINÁMICA APLICADA**Ubicación del despacho:** Edificio Marie Curie (C3), planta 2ª**E-Mail:** marta.perez@uco.es**Teléfono:** 957 212423**Breve descripción de los contenidos**

---

Al final del curso, los estudiantes deberán haber adquirido los siguientes conocimientos teórico-prácticos:

- Los equilibrios que rigen las interacciones macromolécula biológica - ligando(s), y su estudio en el laboratorio mediante espectroscopía de absorción y emisión.
- Las interacciones que se establecen en los complejos proteicos, y su modulación (inhibición o estabilización) mediante otras moléculas.
- Las técnicas computacionales actuales en el diseño de fármacos asistido por ordenador.
- Los cambios conformacionales que sufren las macromoléculas biológicas desde un punto de vista termodinámico, y su estudio en el laboratorio mediante espectroscopía de emisión.
- Los métodos actuales para la cristalización de proteínas, así como las técnicas más comunes de determinación estructural.
- Manejo de una amplia gama de herramientas bioinformáticas y softwares con el fin de: a) procesar los datos experimentales obtenidos en las prácticas de laboratorio, b) analizar información estructural de proteínas, c) analizar las interacciones proteína-ligando(s) y proteína-proteína, d) simular computacionalmente las citadas interacciones (*docking*), e) entender la acción de fármacos sobre sus macromoléculas diana, y f) predecir las potenciales propiedades como fármaco de una molécula.

## Conocimientos previos necesarios

---

### Requisitos previos establecidos en el plan de estudios

El estudiante podrá matricularse de asignaturas optativas una vez que haya superados los 60 créditos de formación básica y, al menos, otros 60 créditos obligatorios.

### Recomendaciones

Asistencia regular a las clases. Conocimiento básico de inglés para consultar la bibliografía y el manejo de herramientas informáticas.

## Programa de la asignatura

---

### 1. Contenidos teóricos

#### LECCION 1. TERMODINÁMICA DE LAS INTERACCIONES LIGANDO-MACROMOLÉCULA

Introducción. Macromoléculas con un único sitio de unión. Equilibrios entre ligandos. Macromoléculas con varios sitios de unión: Sitios iguales e independientes. Sitios diferentes e independientes. Interacción entre sitios y coeficiente de Hill. Acoplamiento de la unión de ligandos desde un punto de vista energético. Determinación experimental del equilibrio ligando-macromolécula.

#### LECCION 2. INTRODUCCIÓN A LOS MÉTODOS DE DOCKING

Introducción. Aspectos energéticos del proceso de unión proteína-ligando. Métodos computacionales. Etapas del docking. Docking macromolecular.

#### LECCION 3. DISEÑO DE FÁRMACOS ASISTIDO POR ORDENADOR

Introducción. Métodos basados en la estructura del ligando (LBDD). Métodos basados en la estructura del target (SBDD). ¿Puede una molécula actuar como un fármaco?: Predicción de la farmacocinética y farmacodinámica.

#### LECCION 4. INTERACCIONES PROTEÍNA - PROTEÍNA

Introducción. Características de las interacciones proteína-proteína (PPIs). Clasificación de las PPIs. Interactoma y bases de datos de PPIs. Moduladores de las PPIs.

#### LECCION 5. CAMBIOS CONFORMACIONALES EN BIOPOLÍMEROS

Introducción. Estabilidad conformacional y cambio. Mecanismo molecular de las transiciones. Tratamiento termodinámico de la transición conformacional. Influencia de la temperatura, pH y concentración salina en los cambios conformacionales. Modelo de plegamiento de dos estados. Intermedios en la desnaturalización de proteínas. Estudios cinéticos de desnaturalización de proteínas. Cambios conformacionales en el ADN.

#### LECCION 6. CRISTALIZACIÓN Y DETERMINACIÓN ESTRUCTURAL DE PROTEÍNAS

Introducción. Aspectos termodinámicos de la cristalización. Técnicas de cristalización de proteínas. Caracterización del cristal mediante técnicas de difracción. Problemas en la determinación de coordenadas. Otras técnicas de determinación estructural.

### 2. Contenidos prácticos

#### Laboratorio:

Práctica 1. Competencia entre ligandos en la unión a una proteína.

Práctica 2. Medida de la constante de unión de un ligando a una proteína mediante espectroscopía de absorción.

Práctica 3. Medida de la constante de unión de un ligando a una proteína mediante fluorescencia.

Práctica 4. Desnaturalización de proteínas en presencia de agentes químicos.

#### **Aula de Informática:**

Práctica de Aula 1. Introducción al MathCad: evaluación de las ecuaciones que rigen la interacción ligandomacromolécula (1ª parte).

Práctica de Aula 2. Evaluación mediante MathCad de las ecuaciones que rigen la interacción ligandomacromolécula (2ª parte). Visualización mediante USCF Chimera de estructuras proteína-ligando y complejos proteína-proteína (análisis de las interfases de interacción).

Práctica de Aula 3. *Molecular docking*: predicción de la estructura de complejos ligando-proteína.

Práctica de Aula 4. Análisis de las interacciones en la acción de fármacos sobre proteínas diana.

#### **Seminarios:**

Seminario 1: Exposición de trabajos.

## **Bibliografía**

---

#### **Bibliografía básica:**

ALLEN, J.P., Biophysical Chemistry, John Wiley & Sons 2008.

ATKINS, P.; DE PAULA, J. Química Física, 8ª Edición, Editorial Médica Panamericana 2008.

CANTOR, C.R.; SCHIMMEL, P.R., Biophysical Chemistry (3 Vol.), W.H. Freeman and Co. 1980.

FREIFELDER, D. Physical Biochemistry. Applications to Biochemistry and Molecular Biology, W.H. Freeman and Co. 1983.

HAMMES, G. G. Thermodynamics and Kinetics for the Biological Sciences, 1ª Ed., John Wiley & Sons 2000.

HAMMES, G. G.; HAMMES-SCHIFFER, S. Physical Chemistry for the Biological Sciences (Methods of Biochemical Analysis) 2ª Ed., Wiley 2015.

YOUNG, D.; Computational Drug Design. A Guide for Computational and Medicinal Chemists, 1ª Ed., John Wiley & Sons 2009.

#### **Bibliografía complementaria:**

LASKOWSKI, W.; POHLIT, W., Biofísica, Ediciones Omega 1999.

BERGETHON, P.R.; SIMONS, E.R., Biophysical Chemistry. Molecules to Membranes, Springer-Verlag 1990.

SCHULTZ, G.E.; SCHIRMER, R.H., Principles of protein structure, Editorial Springer-Verlag 1979.

SILVERMAN, R.; HOLLADAY, M.W.; The Organic Chemistry of Drug Design and Drug Action, 3ª Ed., Academic Press 2014.

SHENG, C.; GEORG, G.I.; Targeting Protein-Protein Interactions by Small Molecules, Springer 2018.

Artículos científicos en revistas especializadas y direcciones web que se actualizan cada curso y se proporcionan con el material didáctico de cada tema concreto.

## Metodología

---

### Adaptaciones metodológicas para alumnado a tiempo parcial y estudiantes con discapacidad y necesidades educativas especiales

En el caso de estudiantes a tiempo parcial, se facilitará la asistencia al grupo que mejor se adapte a sus necesidades.

En el caso de estudiantes con necesidades educativas especiales, la profesora se reunirá con los alumnos afectados para establecer las adaptaciones más adecuadas a cada caso particular, siguiendo las indicaciones del informe emitido por el Área de Inclusión.

### Actividades presenciales

Actividad	Grupo completo	Grupo mediano	Grupo pequeño	Total
Actividades de comunicación oral	-	3	-	3
Actividades de evaluación	3	-	-	3
Actividades de experimentación práctica	-	12	12	24
Actividades de exposición de contenidos elaborados	30	-	-	30
<b>Total horas:</b>	<b>33</b>	<b>15</b>	<b>12</b>	<b>60</b>

### Actividades no presenciales

Actividad	Total
Actividades de búsqueda de información	40
Actividades de procesamiento de la información	50
<b>Total horas:</b>	<b>90</b>

## Resultados del proceso de aprendizaje

---

### Conocimientos, competencias y habilidades

- CB1 Capacidad de razonamiento crítico y autocrítico.
- CB6 Saber reconocer y analizar un problema, identificando sus componentes esenciales, y planear una estrategia científica para resolverlo.
- CB9 Saber comunicar información científica de manera clara y eficaz, incluyendo la capacidad de presentar un trabajo, de forma oral y escrita, a una audiencia profesional, y la de entender el lenguaje y propuestas de otros especialistas.
- CE16 Conocer los principios y aplicaciones de los principales métodos experimentales e instrumentación utilizados en Bioquímica y Biología Molecular, con énfasis en las técnicas de aislamiento y caracterización de macromoléculas biológicas.
- CE4 Comprender los principios que determinan la estructura de las macromoléculas biológicas (incluyendo proteínas y ácidos nucleicos), así como de los complejos

supramoleculares biológicos, y ser capaz de explicar las relaciones entre la estructura y la función.

CE8 Comprender las bases bioquímicas y moleculares del plegamiento, modificación postraduccional, tráfico intracelular, localización subcelular y recambio de las proteínas celulares.

## Métodos e instrumentos de evaluación

Competencias	Examen	Medios orales	Producciones elaboradas por el estudiantado	Proyectos globalizadores de carácter individual o grupal
CB1	X	X	X	X
CB6	X	X	X	X
CB9		X	X	X
CE16		X	X	X
CE4	X		X	X
CE8			X	
<b>Total (100%)</b>	<b>20%</b>	<b>20%</b>	<b>30%</b>	<b>30%</b>
<b>Nota mínima (*)</b>	<b>0</b>	<b>0</b>	<b>0</b>	<b>0</b>

(\*)Nota mínima (sobre 10) necesaria para que el método de evaluación sea considerado en la calificación final de la asignatura. En todo caso, la calificación final para aprobar la asignatura debe ser igual o superior a 5,0.

### Aclaraciones generales sobre los instrumentos de evaluación:

MEDIOS ORALES: Exposición por parejas de un artículo científico: 20% de la calificación total.

PRODUCCIONES ELABORADAS...: Memorias prácticas aula informática 10% y memorias prácticas laboratorio 20%.

EXAMEN: Resolución de cuestiones/problemas relacionados con el temario teórico: 20% de la calificación total.

PROYECTOS GLOBALIZADORES...: Desarrollo de un trabajo escrito a partir de un material proporcionado a cada estudiante por la profesora: 30% de la calificación total.

Todos los instrumentos de evaluación corresponden a evaluación continua.

Las calificaciones de los instrumentos de evaluación se mantienen para todas las convocatorias del curso.

Para estudiantes de segunda matrícula o superior, se conservarán aquellas calificaciones obtenidas por el estudiante en los instrumentos de evaluación superados en el curso 2023-24, si bien el estudiante puede volver a realizar aquellas pruebas que estime oportunas para mejorar su calificación.

### Aclaraciones sobre la evaluación para el alumnado a tiempo parcial y necesidades educativas especiales:

La evaluación para los alumnos a tiempo parcial será la misma que para los alumnos a tiempo no

parcial, si bien puede considerarse la adaptación de los criterios de evaluación para casos concretos de alumnos a tiempo parcial.

El sistema de evaluación será adaptado de acuerdo a las necesidades presentadas por estudiantes con discapacidad y necesidades educativas especiales en los casos en que se requiera, siguiendo las indicaciones del informe emitido por el Área de Inclusión.

### **Aclaraciones sobre la evaluación de la convocatoria extraordinaria y convocatoria extraordinaria de finalización de estudios:**

Los instrumentos de evaluación y ponderación de la convocatoria extraordinaria y convocatoria extraordinaria de finalización de estudios del curso 2024-2025 serán los mismos que para las convocatorias ordinarias, y se conservarán aquellas calificaciones obtenidas por el estudiante en los instrumentos de evaluación superados en el curso 2023-24.

### **Criterios de calificación para la obtención de Matrícula de Honor:**

*Según el artículo 80.3 del Reglamento de Régimen Académico*

### **Objetivos de desarrollo sostenible**

---

Salud y bienestar

---

*Las estrategias metodológicas y el sistema de evaluación contempladas en esta Guía Docente responderán a los principios de igualdad y no discriminación y deberán ser adaptadas de acuerdo a las necesidades presentadas por estudiantes con discapacidad y necesidades educativas especiales en los casos que se requieran. El estudiantado deberá ser informado de los riesgos y las medidas que les afectan, en especial las que puedan tener consecuencias graves o muy graves (artículo 6 de la Política de Seguridad, Salud y Bienestar; BOUCO 23-02-23).*

---