



Guia docent

240EQ321 - 240EQ321 - Biofísica

Última modificació: 27/05/2024

Unitat responsable: Escola d'Enginyeria de Barcelona Est
Unitat que imparteix: 713 - EQ - Departament d'Enginyeria Química.

Titulació: **Curs:** 2024 **Crèdits ECTS:** 4.5
Idiomes: Castellà

PROFESSORAT

Professorat responsable: LUIS JAVIER DEL VALLE MENDOZA

Altres: Primer quadrimestre:
JUAN AYMAMI BOFARULL - T10
JOSEFA DE LOURDES CAMPOS LOPEZ - T10
LUIS JAVIER DEL VALLE MENDOZA - T10
DOMINGO MARTINEZ DE ILARDUYA SAEZ DE ASTEASU - T10
DAVID ZANUY GOMARA - T10

COMPETÈNCIES DE LA TITULACIÓ A LES QUALS CONTRIBUEIX L'ASSIGNATURA

Específiques:

1. Aplicar coneixements de matemàtiques, física, química, biologia i altres ciències naturals, obtinguts mitjançant estudi, experiència, i pràctica, amb raonament crític per establir solucions viables econòmicament a problemes tècnics.
2. Dissenyar productes, processos, sistemes i serveis de la indústria química, així com l'optimització d'altres ja desenvolupats, prenent com a base tecnològica les diverses àrees de l'enginyeria química, comprensives de processos i fenòmens de transport, operacions de separació i enginyeria de les reaccions químiques, nuclears, electroquímiques i bioquímiques.
3. Integrar-se amb facilitat a l'equip tècnic interdisciplinari i creatiu de qualsevol empresa del sector químic o centre de recerca.

Genèriques:

4. Capacitat per aplicar el mètode científic i els principis de l'enginyeria i economia, per formular i resoldre problemes complexos en processos, equips, instal·lacions i serveis, en els quals la matèria experimenti canvis en la seva composició, estat o contingut energètic, característics de la indústria química i d'altres sectors relacionats entre els quals es troben el farmacèutic, biotecnològic, materials, energètic, alimentari o mediambiental
5. Comunicar i discutir propostes i conclusions en fòrums multilingües, especialitzats i no especialitzats, d'una manera clara i sense ambigüitats.
6. Integrar coneixements i enfrontar-se a la complexitat d'emetre judicis i presa de decisions, a partir d'informació incompleta o limitada, que incloguin reflexions sobre les responsabilitats socials i ètiques de l'exercici professional.
7. Posseir les habilitats de l'aprenentatge autònom per mantenir i millorar les competències pròpies de l'enginyeria química que permetin el desenvolupament continu de la professió
8. Tenir capacitat d'anàlisi i síntesi per al progrés continu de productes, processos, sistemes i serveis utilitzant criteris de seguretat, viabilitat econòmica, qualitat i gestió mediambiental.

METODOLOGIES DOCENTS

- MD.1. Contracte d'aprenentatge.
- MD.2. Lliçó magistral.
- MD.3. Aprenentatge autònom pausat.
- MD.4. Aprenentatge cooperatiu.
- MD.5. Aprenentatge basat en projectes, problemes i casos.

OBJECTIUS D'APRENTATGE DE L'ASSIGNATURA

L'assignatura de Biofísica té com a objectiu bàsic proporcionar a l'alumne coneixements físics i fisico-químics que governen els sistemes biològics. En aquest sentit, en el primer contingut de l'assignatura s'aborden diversos conceptes de la química-física que tenen rellevància per comprendre els processos fisiològics i estructurals dels sistemes biològics. Els següents continguts de l'assignatura tracten sobre diverses tècniques de la física i la fisicoquímica (p.e., hidrodinàmica, espectroscòpia, dispersió i difracció, etc.) que es van introduir en el camp d'acció de la biologia, i que en l'actualitat resulten eines indispensables per a l'estudi dels sistemes biològics i els seus components macromoleculares. Finalment, l'últim contingut de l'assignatura es dedica a la simulació estructural i funcional de les macromolècules mitjançant l'aplicació de càlculs basats en dinàmica molecular.

HORES TOTALES DE DEDICACIÓ DE L'ESTUDIANTAT

Tipus	Hores	Percentatge
Hores grup petit	40,5	36.00
Hores aprenentatge autònom	72,0	64.00

Dedicació total: 112.5 h

CONTINGUTS

1. Introducció a la biofísica

Descripció:

- 1.1) Introducció a la Biomecànica. Cinemàtica. Dinàmica. Treball i Energia.
- 1.2) Bases físiques de la Circulació i Respiració. Hidrostàtica. Hidrodinàmica. Viscositat. Gasos. Difusió i Osmosi. Transport a través de membranes biològiques i conducció nerviosa. Propietats físiques de les membranes. Característiques bàsiques dels canals iònics. Potencial d'acció. Axons amb mielina.
- 1.3) La termodinàmica dels éssers vius. Calor i temperatura. Primera llei de la termodinàmica. Segona llei de la termodinàmica.
- 1.4) Bases físiques dels fenòmens bio-elèctrics. Electroestàtica. Electrodinàmica.
- 1.5) Moviment ondulatori. Ondas unidimensionals harmòniques. Ondas sonores. Ondas electromagnètiques. Reflexió. Refracció. Interferència, difracció, polarització. R-X. Làser. Òptica.

Objectius específics:

Consolidar diferents coneixements de la química física en relació als sistemes biològics que seran bases per al desenvolupament de l'assignatura.

Activitats vinculades:

Lectures recomanades. Exercicis i Problemes.

Dedicació: 34h

Classes teòriques: 7h
Classes pràctiques: 2h
Grup gran/Teoria: 7h
Grup mitjà/Pràctiques: 2h
Aprenentatge autònom: 16h



2. Espectroscòpia d'absorció, fluorescència i dicroísmo circular.

Descripció:

- 2.1) Espectroscòpia. Espectroscòpia UV-Visible: identificació, quantificació, i corbes de fusió de biomacromolècules. Turbidimetria. Colorimetria.
- 2.2) Dicroísmo circular: anàlisi d'estructura secundària de biomacromolècules.
- 2.3) Espectroscòpia infraroja (FTIR): identificació i anàlisi d'estructura secundària de biomacromolècules.
- 2.4) Microscòpia òptica: perfilometria. Microscòpia de fluorescència: epifluorescència i confocal
- 2.5) Citometria de flux.

Objectius específics:

Els alumnes analitzaran i discutiran amb fonaments de la biofísica resultats obtinguts per mètodes espectroscòpics sobre l'estructura i funció de biomolècules.

Activitats vinculades:

Exercicis. Lectures seleccionades.
Activitat 1. Anàlisi de macromolècules per mètodes espectroscòpics.

Dedicació: 14h

Classes teòriques: 3h
Classes pràctiques: 1h
Grup gran/Teoria: 3h
Grup mitjà/Pràctiques: 1h
Aprenentatge autònom: 6h

3. Ressonància magnètica nuclear

Descripció:

- 3.1) Radioactivitat. Estructura nuclear, propietats dels nuclis. Radioactivitat, semivida, dosimetria.
- 3.2) Utilització d'isòtops radioactius i no radioactius en el cos humà. Efectes perjudicials.
- 3.3) Ressonància magnètica nuclear.

Objectius específics:

En finalitzar aquest contingut els alumnes hauran de ser capaços d'analitzar un espectre de ressonància magnètica nuclear.

Activitats vinculades:

Lectures seleccionades.
Exercicis i Problemes

Dedicació: 10h

Classes teòriques: 2h
Classes pràctiques: 1h
Grup gran/Teoria: 2h
Grup mitjà/Pràctiques: 1h
Aprenentatge autònom: 4h



4. Cristal·lografia i difracció de rajos X

Descripció:

- 4.1) Cristal·lització.
- 4.2) Recollida de dades de difracció de rajos X.
- 4.3) Tractament de les dades de difracció: determinació del grup espacial, indexat i escalat de les dades.
- 4.4) Mètodes de resolució d'estructures. Refinament d'estructures. Mapes de densitat electrònica. Validació de l'estructura. Bancs de dades estructurals.

Objectius específics:

Conèixer la metodologia per determinar l'estructura d'una biomacromolècula per difracció de rajos X de cristall únic.

Activitats vinculades:

Lectures seleccionades.
Activitat 2. Determinació de l'estructura d'una biomacromolècula.

Dedicació: 21h

Classes teòriques: 4h
Classes pràctiques: 2h
Grup gran/Teoria: 4h
Grup mitjà/Pràctiques: 2h
Aprentatge autònom: 9h

5. Modelització molecular i determinació estructural basat en dinàmica molecular

Descripció:

- 5.1) Modelització molecular i aplicacions en bioenginyeria.
- 5.2) Energia potencial. Camp de forces. Minimització (tècniques).
- 5.3) Dinàmica molecular (MD). Definició. Dinàmica clàssica. Càlcul de gradients. Integració numèrica. Trajectòria de MD. Aspectes pràctics. Protocol. Propietats que poden calcular-se a partir d'una MD. Limitacions. Exemples.
- 5.4) Reconeixement molecular. Propietats electrostàtiques de les biomolècules. Docking: Com saber on s'enllaçarà un lligant (algorismes de cerca, funcions de scoring, resultats de clustering, limitacions, exemples). Càlcul de constants d'enllaç.

Objectius específics:

Capacitat per analitzar i comparar diferent informació experimental i computacional per a la determinació de l'estructura i funció de les macromolècules.

Activitats vinculades:

Activitat 3: Introducció a la simulació estructural de biomolècules mitjançant dinàmica molecular.

Dedicació: 18h

Classes teòriques: 4h
Classes pràctiques: 1h
Grup gran/Teoria: 4h
Grup mitjà/Pràctiques: 1h
Aprentatge autònom: 8h

SISTEMA DE QUALIFICACIÓ

La qualificació final de l'assignatura serà calculada d'acord a diferents sistemes d'avaluació de la següent forma:

Qualificació final = 55%(IE.3)+40%(IE.4)+ 5%(IE.7)

On: IE.3) Test en finalitzar cada contingut de l'assignatura; IE.4) Informes formals de les activitats; i IE.7) Valoració discrecional pels professors.

NORMES PER A LA REALITZACIÓ DE LES PROVES.

Els test (IE.3) en finalitzar cada contingut de l'assignatura seran realitzats usant el portal virtual ATENEA basat en Moodle, o en defecte d'això correspondrà a un examen escrit.

Els alumnes estan obligats a presentar els informes formals de les activitats (IE.4).

La qualificació de la valoració discrecional (IE.7) serà establerta per tots els professors que participen en l'assignatura.

BIBLIOGRAFIA

Bàsica:

- Laurendeau, Normand M. Statistical thermodynamics : fundamentals and applications [en línia]. Cambridge: Cambridge University Press, 2005 [Consulta: 21/05/2020]. Disponible a: <http://site.ebrary.com/lib/upcatalunya/docDetail.action?docID=10129076>. ISBN 9780511139086.
- Freifelder, David. Técnicas de bioquímica y biología molecular. Barcelona: Reverté, 1979. ISBN 8429118195.
- Lesk, Arthur M. Introduction to protein science : architecture, function, and genomics. Oxford, UK: Oxford University Press, 2004. ISBN 0199265119.
- Gómez-Moreno Calera, Carlos; Sancho Sanz, Javier (coords.). Estructura de proteínas. Barcelona: Ariel, 2003. ISBN 8434480616.
- Glusker, Jenny Pickworth; Trueblood, Kenneth N. Crystal structure analysis : a primer. 3rd ed. New York [etc.]: Oxford University Press, 2010. ISBN 9780199576340.
- Drenth, Jan. Principles of protein X-ray crystallography. 3rd ed. New York: Springer science+Business Media, cop. 2010. ISBN 9781441922106.
- Carter, Charles W.; Sweet, Robert M. (eds.). Macromolecular crystallography. Part A. San Diego (Calif.) [etc.]: Academic Press, cop. 1997-2003. ISBN 0121821773.
- Carter, Charles W.; Sweet, Robert M. (eds.). Macromolecular crystallography. Part B. San Diego (Calif.) [etc.]: Academic Press, cop. 1997-2003. ISBN 0121821781.
- Leach, Andrew R. Molecular modelling : principles and applications. 2nd ed. Harlow [etc.]: Prentice Hall, 2001. ISBN 0582382106.
- Schlick, Tamar. Molecular modeling and simulation : an interdisciplinary guide [en línia]. New York, NY: Springer New York, 2010 [Consulta: 21/05/2020]. Disponible a: <http://dx.doi.org/10.1007/978-1-4419-6351-2>. ISBN 9781441963512.
- Frenkel, Daan; Smit, Berend. Understanding molecular simulation : from algorithms to applications. [2nd ed.]. San Diego [etc.]: Academic Press, cop. 2002. ISBN 0122673514.