

**FICHA IDENTIFICATIVA****Datos de la Asignatura**

Código	44709
Nombre	Química orgánica computacional
Ciclo	Máster
Créditos ECTS	4.0
Curso académico	2022 - 2023

Titulación(es)

Titulación	Centro	Curso	Periodo
2226 - M.U. en Química Orgánica	Facultad de Química	1	Anual

Materias

Titulación	Materia	Caracter
2226 - M.U. en Química Orgánica	5 - Química orgánica computacional	Obligatoria

Coordinación

Nombre	Departamento
DEL POZO LOSADA, CARLOS	325 - Química Orgánica

RESUMEN

La asignatura Química Orgánica Computacional trata del estudio de diferentes técnicas computacionales como herramientas útiles en estudios de propiedades químicas y estudios mecanísticos y que resultan de interés en el diseño racional de fármacos.

CONOCIMIENTOS PREVIOS**Relación con otras asignaturas de la misma titulación**

No se han especificado restricciones de matrícula con otras asignaturas del plan de estudios.

Otros tipos de requisitos

La asignatura Química Orgánica Computacional requiere de una base sólida de Química Orgánica y Bioquímica



COMPETENCIAS

2226 - M.U. en Química Orgánica

- Que los/las 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.
- Que los/las 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.
- Que los/las 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.
- Que los/las estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo
- 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.
- Utilizar las distintas técnicas de exposición -oral, escrita, presentaciones, paneles, etc- para comunicar sus conocimientos, propuestas y posiciones.
- Ser capaces de acceder a herramientas de información en otras áreas del conocimiento y utilizarlas apropiadamente.
- Saber participar en debates y discusiones, dirigirlos y coordinarlos y ser capaces de resumirlos y extraer de ellos las conclusiones más relevantes y aceptadas por la mayoría.
- Poseer habilidades sociales, un buen nivel de comunicación oral y escrita, así como capacidad para trabajar en equipo y con personas de diferentes procedencias.
- Competencias de gestión tales como la capacidad para la planificación y gestión de tiempo y recursos, así como para dirigir y tomar decisiones.
- Ser capaces de valorar la necesidad de completar su formación científica, en lenguas, en informática, asistiendo a conferencias o cursos y/o realizando actividades complementarias, autoevaluando la aportación que la realización de estas actividades supone para su formación integral.
- Ampliar los conceptos básicos en los que se apoyan las diferentes técnicas computacionales, especialmente aquellas empleadas en Química Orgánica como herramientas útiles en estudios de propiedades químicas y estudios mecanísticos.
- Conocer las bases químicas para el diseño racional de fármacos mediante la utilización de técnicas computacionales y de modelado molecular.



RESULTADOS DE APRENDIZAJE

- Conocer los conceptos básicos en los que se apoyan las diferentes técnicas computacionales, especialmente aquellas empleadas en Química Orgánica, y Química Biológica relacionadas con la industria farmacéutica, como herramientas útiles en estudios de propiedades químicas y estudios mecanísticos.
- Conocer las bases químicas para el diseño racional de fármacos y para el entendimiento y estudio de procesos de reconocimiento molecular con interés biológico mediante la utilización de técnicas computacionales y de modelado molecular.
- Conocer algunas técnicas computacionales empleadas en el estudio de procesos de reconocimiento molecular de procesos biológicos con relevancia para el diseño de fármacos.
- Que el alumno sepa combinar los datos de RMN con los obtenidos mediante técnicas de química computacional y de modelado molecular para comprender, a escala atómica, los requerimientos estructurales de procesos de reconocimiento molecular ligando-receptor con interés biomédico y así avanzar en el diseño de fármacos y en el entendimiento de procesos biológicos.
- Diseñar, seleccionar y/o desarrollar productos y procesos químicos eficientes (ODS 7) y que minimicen su impacto sobre el medio ambiente (ODS 14 y 15), aprovechen materias primas alternativas y generen una menor cantidad de residuos (ODS 11).

DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

1. Química Orgánica Computacional. Introducción

Introducción. Conceptos. Relación con otras disciplinas. Aplicaciones en la Industria Farmacéutica. Química Biológica Computacional. Diseño y descubrimientos de fármacos

2. Química Cuántica

Química Cuántica. Métodos en mecánica cuántica. Métodos ab initio. Métodos semi-empíricos. DFT. Exploración de las superficies de energía potencial: mínimos de energía y estados de transición. Propiedades electrónicas. Propiedades termodinámicas

3. Mecánica Molecular

Mecánica Molecular. Campos de fuerzas. Términos enlazantes. Términos no enlazantes. Parametrización de campos de fuerzas. Optimización de la energía. Análisis conformacional. Dinámica molecular. Tratamiento del efecto del disolvente. Análisis de trayectorias. Métodos híbridos QM/MM.



4. Química computacional en el diseño de fármacos

Química Computacional en el Diseño de Fármacos: Reconocimiento molecular. Interacciones ligando-receptor. Relación estructura-actividad. Propiedades de los productos drug-like. Generación de moléculas. Descripción molecular. Diseño de fármacos basado en la estructura: bases de datos, interacciones macromolécula-ligando, docking proteína-ligando y proteína-proteína, cribado virtual. Diseño de fármacos basado en el ligando: QSAR-2D, QSAR-3D, farmacóforos. Modelado de macromoléculas. Predicción de estructura. Combinación con datos experimentales: RMN y cristalografía de rayos-X.

5. Prácticas

PROGRAMA DE PRÁCTICAS (Aula de informática): Modelado molecular y cálculo de algunas propiedades de compuestos orgánicos y fármacos. Estudios de mecanismos de reacciones orgánicas. Visualización y manipulación de complejos ligando-receptor. Docking proteína-ligando y proteína-proteína. Identificación de interacciones relevantes en procesos de reconocimiento molecular. Utilización de bases de datos bibliográficas y de estructuras 3D. Utilización de recursos informáticos para el cálculo de propiedades drug-like de compuestos orgánicos

VOLUMEN DE TRABAJO

ACTIVIDAD	Horas	% Presencial
Clases de teoría	20,00	100
Seminarios	20,00	100
TOTAL	40,00	

METODOLOGÍA DOCENTE

La asignatura está planteada para que el estudiante sea el protagonista de su propio aprendizaje y se estructura de la siguiente manera:

- Desde el principio de curso los estudiantes dispondrán de todo el material didáctico correspondiente al curso.
- Clases magistrales (presenciales).- En estas clases se introducirán los conceptos básicos de la asignatura. Se impartirán clases teóricas en las que se desarrollará el contenido del programa con la ayuda de presentaciones PowerPoint. También se hará uso de recursos quimioinformáticos y páginas web. Se fomentará la participación activa del alumno mediante el planteamiento de cuestiones relacionadas con la aplicación de conceptos y conocimientos previamente adquiridos por el alumno. Se fomentará y propiciará el establecimiento de discusiones sobre las cuestiones planteadas.
- Clases prácticas (presenciales).- Se impartirán talleres en los que habrá una mayor interacción entre el profesor y los alumnos. En estos talleres, se pretende que el alumno ponga en práctica algunos de los conocimientos adquiridos mediante el empleo de algunas herramientas computacionales : Gaussian, GaussView, DS Visualizar, RasMol, Molekel, AutoDock, Glide, Amber, etc. Esta actividad docente estará dedicada a la resolución de problemas y cuestiones con la participación activa del estudiante.



- Trabajos.- Realización de trabajos en los que el alumno tendrá que demostrar el conocimiento de los conceptos impartidos y el empleo de las técnicas computacionales que se han explicado en el curso.

EVALUACIÓN

Habrà una evaluaci3n continua basada en el seguimiento e interacci3n con el alumno a lo largo del desarrollo de las clases presenciales (25%). Ademàs, se contarà con los trabajos (25%), cuestionarios e informes (50%) que el alumno deberà realizar como parte de su trabajo personal. La valoraci3n final del alumno serà un compendio de todas estas actividades y trabajos

REFERENCIAS

Bàsicas

- Andrew R. Leach, Molecular Modelling, Principles and Applications, 2nd Edition, Pearson, Prentice Hall, 2001.
- Grant, G.H.; Richards, W.G.; Computational Chemistry. Oxford University Press, 1996.
- David C. Young. Computational Drug Design. A Guide for Computational and Medicinal Chemists. John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, NJ. 2009.
- Steven M. Bachrach. Computational Organic Chemistry. Wiley-Blackwell. 2007.

Complementarias

- J. Naidoo, John Brady, Martin J. Field, Jiali Gao, and Michael Hann. Modelling Molecular Structure and Reactivity in Biological Systems. Royal Society of Chemistry Cambridge. 2006.
- Errol G. Lewars. Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics. Springer. 2nd ed. 2011.
- S. L. Schreiber, T. M. Kapoor, G. Wess. Chemical Biology: From Small Molecules to Systems Biology and Drug Design. Wiley. 2007.
- Raimund Mannhold (Editor) (2008). Molecular Drug Properties: Measurement and Prediction. Wiley/VCH, Weinheim, Germany
- David Young. Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real World Problems. WileyBlackwell. 2009.
- Gaussian Website: <http://www.gaussian.com/>
- AutoDock Website: <http://autodock.scripps.edu/>
- The World Association of Theoretical and Computational Chemists, WATOC.
<http://www.ch.ic.ac.uk/watoc/.index.html>



- Amber Molecular Dynamics package Website: www.ambermd.org
- Zdock Website: <http://zdock.umassmed.edu/>
- Protein Data Bank: (<http://www.rcsb.org>)
- Cambridge Structural Database System: <http://www.ccdc.cam.ac.uk/prods/csd/csd.html>
- Drug Bank: <http://www.drugbank.ca>

