

**FITXA IDENTIFICATIVA****Dades de l'Assignatura**

Codi	44709
Nom	Química orgànica computacional
Cicle	Màster
Crèdits ECTS	4.0
Curs acadèmic	2022 - 2023

Titulació/titulacions

Titulació	Centre	Curs	Període
2226 - M.U. en Química Orgànica	Facultat de Química	1	Anual

Matèries

Titulació	Matèria	Caràcter
2226 - M.U. en Química Orgànica	5 - Química orgànica computacional	Obligatòria

Coordinació

Nom	Departament
DEL POZO LOSADA, CARLOS	325 - Química Orgànica

RESUM

L'assignatura Química Orgànica Computacional tracta de l'estudi de diferents tècniques computacionals com a eines útils en estudis de propietats químiques i estudis *mecanístics i que resulten d'interés en el disseny racional de fàrmacs.

CONEIXEMENTS PREVIS**Relació amb altres assignatures de la mateixa titulació**

No heu especificat les restriccions de matrícula amb altres assignatures del pla d'estudis.

Altres tipus de requisits

L'assignatura Química Orgànica Computacional requereix d'una base sòlida de Química Orgànica i Bioquímica.



COMPETÈNCIES

2226 - M.U. en Química Orgànica

- Que els estudiants sàpiguen aplicar els coneixements adquirits i la seua capacitat de resolució de problemes en entorns nous o poc coneguts dins de contextos més amplis (o multidisciplinaris) relacionats amb la seua àrea d'estudi.
- Que els estudiants siguen capaços d'integrar coneixements i afrontar la complexitat de formular judicis a partir d'una informació que, sent incompleta o limitada, incloga reflexions sobre les responsabilitats socials i ètiques vinculades a l'aplicació dels seus coneixements i judicis.
- Que els estudiants sàpiguen comunicar les conclusions (i els coneixements i les raons últimes que les sustenten) a públics especialitzats i no especialitzats d'una manera clara i sense ambigüitats.
- Que els estudiants posseïsquen les habilitats d'aprenentatge que els permeten continuar estudiant d'una forma que haurà de ser en gran manera autodirigida o autònoma.
- Posseir i comprendre coneixements que aportin una base o oportunitat de ser originals en el desenvolupament i / o aplicació d'idees, sovint en un context de recerca.
- Utilitzar les diferents tècniques d'exposició-oral, escrita, presentacions, panells, etc-per comunicar els seus coneixements, propostes i posicions.
- Ser capaços d'accedir a ferramentes d'informació en altres àrees del coneixement i utilitzar-les apropiadament.
- Saber participar en debats i discussions, dirigir-los i coordinar-los i ser capaços de resumir-los i extraure d'ells les conclusions més rellevants i acceptades per la majoria.
- Posseir habilitats socials, un bon nivell de comunicació oral i escrita, així com capacitat per a treballar en equip i amb persones de diferents procedències.
- Competències de gestió com ara la capacitat per a la planificació i gestió de temps i recursos, així com per a dirigir i prendre decisions.
- Ser capaços de valorar la necessitat de completar la seua formació científica, en llengües, en informàtica, assistint a conferències o cursos i/o realitzant activitats complementàries, autoavaluant l'aportació que la realització d'estes activitats suposa per a la seua formació integral.
- Ampliar els conceptes bàsics en què es recolzen les diferents tècniques computacionals, especialment aquelles empleades en Química Orgànica com a ferramentes útils en estudis de propietats químiques i estudis mecanístics.
- Conèixer les bases químiques per al disseny racional de fàrmacs per mitjà de la utilització de tècniques computacionals i de modelatge molecular.

RESULTATS DE L'APRENTATGE



Conèixer els conceptes bàsics en els quals es donen suport a les diferents tècniques computacionals, especialment aquelles emprades en Química Orgànica, i Química Biològica relacionades amb la indústria farmacèutica, com a eines útils en estudis de propietats químiques i estudis *mecanístics.

- Conèixer les bases químiques per al disseny racional de fàrmacs i per a l'enteniment i estudi de processos de reconeixement molecular amb interès biològic mitjançant la utilització de tècniques computacionals i de modelatge molecular.
- Conèixer algunes tècniques computacionals emprades en l'estudi de processos de reconeixement molecular de processos biològics amb rellevància per al disseny de fàrmacs.
- Que l'alumne sàpia combinar les dades de *RMN amb els obtinguts mitjançant tècniques de química computacional i de modelatge molecular per a comprendre, a escala atòmica, els requeriments estructurals de processos de reconeixement molecular lligant-receptor amb interès biomèdic i així avançar en el disseny de fàrmacs i en l'enteniment de processos biològics.
- Dissenyar, seleccionar i/o desenvolupar productes i processos químics eficients (ODS 7) i que minimitzen el seu impacte sobre el medi ambient (ODS 14 i 15), aprofiten matèries primeres alternatives i generen una menor quantitat de residus (ODS 11).

DESCRIPCIÓ DE CONTINGUTS

1. Química Orgànica Computacional. Introducció

Introducció. Conceptes. Relació amb altres disciplines. Aplicacions en la Indústria Farmacèutica. Química Biològica Computacional. Disseny i descobriments de fàrmacs

2. Química Quàntica

Química Quàntica. Mètodes en mecànica quàntica. Mètodes ab initio. Mètodes semi-empírics. DFT. Exploració de les superfícies d'energia potencial: mínims d'energia i estats de transició. Propietats electròniques. Propietats termodinàmiques

3. Mecànica Molecular

Mecànica Molecular. Campos de forces. Termes enllaçants. Termes no enllaçants. Parametrització de camps de forces. Optimització de l'energia. Anàlisi conformacional. Dinàmica molecular. Tractament de l'efecte del dissolvent. Anàlisi de trajectòries. Mètodes híbrids QM/MM

4. Química Computacional en el Disseny de Fàrmacs

Química Computacional en el Disseny de Fàrmacs: Reconeixement molecular. Interaccions lligant-receptor. Relació estructura-activitat. Propietats dels productes drug-like. Generació de molècules. Descripció molecular. Disseny de fàrmacs basat en l'estructura: bases de dades, interaccions macromolècula-lligant, docking proteïna-lligant i proteïna-proteïna, garbellat virtual. Disseny de fàrmacs basat en el lligant: QSAR-2D, *QSAR-3D, farmacòforos. Modelatge de macromolècules. Predicció



d'estructura. Combinació amb dades experimentals: RMN i cristal·lografia de raigs-X.

5. Pràctiques

PROGRAMA DE PRÀCTIQUES (Aula d'informàtica): Modelatge molecular i càlcul d'algunes propietats de compostos orgànics i fàrmacs. Estudis de mecanismes de reaccions orgàniques. Visualització i manipulació de complexos lligant-receptor. Docking proteïna-lligant i proteïna-proteïna. Identificació d'interaccions rellevants en processos de reconeixement molecular. Utilització de bases de dades bibliogràfiques i d'estructures 3D. Utilització de recursos informàtics per al càlcul de propietats drug-like de compostos orgànics

VOLUM DE TREBALL

ACTIVITAT	Hores	% Presencial
Classes de teoria	20,00	100
Seminaris	20,00	100
TOTAL	40,00	

METODOLOGIA DOCENT

L'assignatura està plantejada perquè l'estudiant siga el protagonista del seu propi aprenentatge i s'estructura de la següent manera:

- Des del principi de curs els estudiants disposaran de tot el material didàctic corresponent al curs.
- Classes magistrals (presencials).- En aquestes classes s'introduiran els conceptes bàsics de l'assignatura. S'impartiran classes teòriques en les quals es desenvoluparà el contingut del programa amb l'ajuda de presentacions *PowerPoint. També es farà ús de recursos *quimioinformàtics i pàgines web. Es fomentarà la participació activa de l'alumne mitjançant el plantejament de qüestions relacionades amb l'aplicació de conceptes i coneixements prèviament adquirits per l'alumne. Es fomentarà i propiciarà l'establiment de discussions sobre les qüestions plantejades.
- Classes pràctiques (presencials).- S'impartiran tallers en els quals hi haurà una major interacció entre el professor i els alumnes. En aquests tallers, es pretén que l'alumne pose en pràctica alguns dels coneixements adquirits mitjançant l'ús d'algunes eines computacionals : *Gaussian, *GaussView, *DS Visualitzar, *RasMol, *Molekel, *AutoDock, *Glide, *Amber, etc. Aquesta activitat docent estarà dedicada a la resolució de problemes i qüestions amb la participació activa de l'estudiant.
- Treballs.- Realització de treballs en els quals l'alumne haurà de demostrar el coneixement dels conceptes impartits i l'ús de les tècniques computacionals que s'han explicat en el curs



AVALUACIÓ

Hi haurà una avaluació contínua basada en el seguiment i interacció amb l'alumne al llarg del desenvolupament de les classes presencials (25%). A més, es comptarà amb els treballs (25%), qüestionaris i informes (50%) que l'alumne haurà de realitzar com a part del seu treball personal. La valoració final de l'alumne serà un compendi de totes aquestes activitats i treballs.

REFERÈNCIES

Bàsiques

- 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.

Complementàries

- 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>

