

	<b>Contenidos Programáticos Programas de Pregrado</b>	<b>Código</b>	FGA-23 v.03
		<b>Página</b>	1 de 13

## FACULTAD: CIENCIAS BÁSICAS

### PROGRAMA: QUÍMICA

#### DEPARTAMENTO DE: QUÍMICA

<b>CURSO:</b>	Química Computacional	
<b>CÓDIGO:</b>	156300	
<b>ÁREA:</b>	Profesional	
<b>REQUISITOS:</b>		<b>CORREQUISITO:</b>
<b>CRÉDITOS:</b>		<b>TIPO DE CURSO:</b> Teórico-Práctico
<b>FECHA ÚLTIMA ACTUALIZACIÓN</b>		

#### JUSTIFICACIÓN

La química computacional engloba un conjunto basto de herramientas teóricas/computacionales que permiten predecir diversas propiedades de interés químico; así como también ahondar más allá que las herramientas instrumentales están limitadas. Es por ello, la química computacional ha sido un factor clave en el enorme desarrollo de nuevo conocimiento que han permitido acelerar la comprensión de diversos fenómenos que ocurren a escala atómica molecular, tales como propiedades estructurales, energéticas y entre muchas otras y su impacto tanto en la investigación como en la industria ha sido tal que su uso en la actualidad es necesario e indiscutible. Por las razones anteriores, este curso pretende presentar al estudiante de química, y áreas afines, las ventajas y desventajas del uso de algunas herramientas computacionales. Principalmente, aquellas desarrolladas en el marco de la mecánica clásica, mecánica molecular y dinámica molecular.

#### OBJETIVO GENERAL

Brindar los conocimientos y herramientas computacionales mínimas y necesarias para introducir al estudiante de pregrado en química, y áreas afines, en el ámbito del estudio y predicción de propiedades de sistemas a escala atómica/molecular de impacto científico y tecnológico.

	<b>Contenidos Programáticos Programas de Pregrado</b>	<b>Código</b>	FGA-23 v.03
		<b>Página</b>	2 de 13

## OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Identificar las bondades que ofrece el uso de las herramientas teóricas basada en mecánica clásica y mecánica cuántica para predecir propiedades estructurales, energéticas y de transportes de sistemas atómicos/moleculares.
- Recoger las diferencias entre mecánica clásica, dinámica molecular y mecánica cuántica.
- Capacidad para la obtención de datos mínimos basados en la mecánica clásica para la descripción de sistemas atómicos/moleculares.

## COMPETENCIAS

- ✓ Conocimientos básicos sobre mecánica molecular y dinámica molecular.
- ✓ Destrezas mínimas en el manejo de Linux.
- ✓ Destrezas mínimas en el uso de programas computacional para el estudio de propiedades estructurales, energéticas y de transporte en sistemas atómicos/moleculares.

## UNIDAD 1: CONCEPTOS GENERALES SOBRE QUÍMICA COMPUTACIONAL.

ITEMA	HORAS DE CONTACTO DIRECTO	HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE
Introducción hacia la química computacional.	2	4
Mecánica clásica versus mecánica cuántica.	2	2
Campos de fuerzas: generalidades, desarrollo histórico, tipos de campos de fuerza. Campos de fuerza AMBER Y CHARMM.	4	8

## UNIDAD 2: CAMPOS DE FUERZAS EN SISTEMAS ATÓMICOS/MOLECULARES.

TEMA	HORAS DE CONTACTO DIRECTO	HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE
Generalidades, funciones de energía potencial enlazantes y no enlazantes.	2	2
Hacia la obtención de campos de fuerzas en sistemas atómicos moleculares.	2	2
Practica 1: obtención de los campos de fuerza para moléculas orgánicas: usando CGenFF y AMBERTOOLS (AMBER ff). Obtención de parámetros de campo de	4	8

	<b>Contenidos Programáticos Programas de Pregrado</b>	<b>Código</b>	FGA-23 v.03
		<b>Página</b>	3 de 13

fuerza del carvacrol.		
Practica 2: validación de campos de fuerza de la molécula carvacrol.	4	8

## EVALUACIÓN – PRIMER CORTE

### UNIDAD 3: DINÁMICA MOLECULAR.

TEMA	HORAS DE CONTACTO DIRECTO	HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE
Generalidades sobre la dinámica molecular: historia, avances, dinámica molecular y muestre Monte Carlo.	1	2
Ecuaciones de movimiento en dinámica molecular, cálculo de fuerzas, aceleración y posiciones atómicas.	1	2
Algoritmos y programas computacionales basados en dinámica molecular: introducción a Gromacs.	2	4
Practica 3: simulación mediante dinámica molecular del carvacrol en fase gaseosa y obtención de propiedades estructurales y energéticas.	4	8

### UNIDAD 4: CÁLCULOS DE PROPIEDADES CON DINÁMICA MOLECULAR.

TEMA	HORAS DE CONTACTO DIRECTO	HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE
Generalidades.	2	4
Propiedades estructurales, energéticas y de transporte a partir de simulaciones de dinámica molecular.	2	4
Practica 4: dinámica molecular y obtención de propiedades estructurales y de transporte de solventes orgánicos. Caso de estudio: solventes orgánicos como hexano, heptano, butanol y propanol.	4	8

## EVALUACIÓN – SEGUNDO CORTE

	<b>Contenidos Programáticos Programas de Pregrado</b>	<b>Código</b>	FGA-23 v.03
	<b>Página</b>	4 de 13	

#### UNIDAD 5: ACOPLAMIENTO MOLECULAR.

<b>TEMA</b>	<b>HORAS DE CONTACTO DIRECTO</b>	<b>HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE</b>
Introducción al acoplamiento molecular: generalidades, impacto en el estudio de proteínas y receptores, ejemplos, funciones de puntuación.	2	4
Programas computacionales basados en cálculos de acoplamiento molecular.	2	4
Practica 5: estudio de las interacciones proteína-ligando de un sistema de referencia. Caso de estudio: acoplamiento molecular entre la proteína humana adiposo de ácido graso (PDB: 2NNQ) en complejo con el ácido ((2'-(5-etil-3,4-difenil-1H-pirazol-1-il)-3-bifenilil)oxi) acético.	4	8

#### UNIDAD 6: ACOPLAMIENTO MOLECULAR Y DINÁMICA MOLECULAR.

<b>TEMA</b>	<b>HORAS DE CONTACTO DIRECTO</b>	<b>HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE</b>
Generalidades.	2	4
Propiedades estructurales, energéticas y dinámicas en estudios de acoplamiento molecular en combinación con dinámica molecular.	2	4
Practica 6: Estudio de la estabilidad del complejo entre la proteína humana adiposo de ácido graso (PDB: 2NNQ) y el ácido ((2'-(5-etil-3,4-difenil-1H-pirazol-1-il)-3-bifenilil)oxi) acético.	4	8

#### EVALUACIÓN – TERCER CORTE

#### METODOLOGÍA

- ✓ Las clases se desarrollarán de manera magistral con participación de los estudiantes, quienes previamente deben leer los temas para aportar sus ideas o exponer sus dudas.
- ✓ Se desarrollarán prácticas, con el uso de computadores para aplicar y afianzar los conceptos vistos.

	<b>Contenidos Programáticos Programas de Pregrado</b>	<b>Código</b>	FGA-23 v.03
		<b>Página</b>	5 de 13

## SISTEMA DE EVALUACIÓN

**Primer corte:**

20% Evaluación; 15% Informes

**Segundo corte:**

20% Evaluación; 15% Informes

**Tercer corte:**

20% Evaluación; 10% Informes

## BIBLIOGRAFÍA DISPONIBLE EN UNIDAD DE RECURSOS BIBLIOGRÁFICOS DE LA UNIVERSIDAD DE PAMPLONA

1. Levine I., Fisicoquímica, 5<sup>a</sup> Edición, McGrawHill, (B. Central: 541.3/L665f).
2. Atkins P.W., Physical Chemistry, 6th Edition, Oxford U.P., Oxford, 1998. (B. MFE 541.3 A874p).

## BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

1. GROMACS: Groningen Machine for Chemical Simulations. User manual. <http://manual.gromacs.org/current/manual-2020.1.pdf>.
2. T. Schlick, Molecular modelling and simulation (Springer, 2006).
3. D. Frenkel and B. Smit, Understanding Molecular Simulation, 2nd Edition, Academic Press, San Diego, 2002.
4. M. Allen and D. Tildesley, Computer Simulation of Liquids, Clarendon Press, Oxford, 1987.
5. J. M. Haile, Molecular Dynamics simulations, John Wiley and sons, 1997.
6. A. R. Leach, Molecular modelling. Principles and applications, Prentice Hall, 2001.
7. F. Jensen, Introduction to Computational Chemistry, John Wiley & Sons Ltd, second edition, 2007.
8. E. Lewars, Computational chemistry: introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics, Kluwer Academic Publishers, 2004.
9. K. A. Dill and S. Bromberg, Molecular driving forces: statistical thermodynamics in chemistry and biology, Taylor and Francis Group, 2003.

	<b>Contenidos Programáticos Programas de Pregrado</b>	<b>Código</b>	FGA-23 v.03
		<b>Página</b>	6 de 13

## DIRECCIONES ELECTRÓNICAS DE APOYO AL CURSO

- <http://www.elsevier.com/>
- <https://webbook.nist.gov/chemistry/>
- <https://ambermd.org/>
- <http://www.gromacs.org/>
- <https://www.msg.chem.iastate.edu/gamess/>
- <http://autodock.scripps.edu/>
- <http://gabedit.sourceforge.net/>
- <https://www.cgl.ucsf.edu/chimera/>
- <https://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>
- <http://www.mdtutorials.com/gmx/>
- <http://cgenff.umaryland.edu/>
- <https://www.rcsb.org/>
- <https://www.charmm-gui.org/>
- <https://www.ebi.ac.uk/thornton-srv/software/LIGPLOT/>



## Contenidos Programáticos Programas de Pregrado

Código

FGA-23 v.03

Página

7 de 13

### UNIDAD No. 1

### NOMBRE DE LA UNIDAD: CONCEPTOS GENERALES SOBRE QUÍMICA COMPUTACIONAL.

### COMPETENCIAS A DESARROLLAR

CONTENIDOS	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL PROFESOR	HORAS CONTACTO DIRECTO	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL ESTUDIANTE	HORAS TRABAJO INDEPENDIENTE	HORAS ACOMPAÑAMIENTO AL TRABAJO INDEPENDIENTE	ESTRATEGÍAS DE EVALUACIÓN QUE INCLUYA LA EVALUACIÓN DEL TRABAJO INDEPENDIENTE
Introducción hacia la química computacional.  Mecánica clásica versus mecánica cuántica.  Campos de fuerzas: generalidades, desarrollo histórico, tipos de campos de fuerza. Campos de fuerza AMBER Y CHARMM.	Preparación de clases  Clase magistral presentando los temas propuestos  Proposición de lecturas de artículos de revisión relacionados con el tema  Preparación de los protocolos necesarios para desarrollar las prácticas computacionales propuestas	8	Lecturas propuestas por el profesor  Desarrollar las prácticas propuestas en la unidad  Entrega de informes y análisis de los resultados	16	2	Parcial  Informes de las prácticas computacionales



## Contenidos Programáticos Programas de Pregrado

Código

FGA-23 v.03

Página

8 de 13

### UNIDAD No. 2

#### NOMBRE DE LA UNIDAD: CAMPOS DE FUERZAS EN SISTEMAS ATÓMICOS/MOLECULARES.

#### COMPETENCIAS A DESARROLLAR

CONTENIDOS	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL PROFESOR	HORAS CONTACTO DIRECTO	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL ESTUDIANTE	HORAS TRABAJO INDEPENDIENTE	HORAS ACOMPAÑAMIENTO AL TRABAJO INDEPENDIENTE	ESTRATEGÍAS DE EVALUACIÓN QUE INCLUYA LA EVALUACIÓN DEL TRABAJO INDEPENDIENTE
Generalidades, funciones de energía potencial enlazantes y no enlazantes.  Hacia la obtención de campos de fuerzas en sistemas atómicos moleculares.  Practica 1: obtención de los campos de fuerza para moléculas orgánicas: usando CGenFF y AMBERTOOLS (AMBER ff). Obtención de parámetros de campo de fuerza del carvacrol.  Practica 2: validación de campos de fuerza de la molécula carvacrol.	Preparación de clases  Clase magistral presentando los temas propuestos  Proposición de lecturas de artículos de revisión relacionados con el tema  Preparación de los protocolos necesarios para desarrollar las prácticas computacionales propuestas	12	Lecturas propuestas por el profesor  Desarrolla las prácticas propuestas en la unidad  Entrega de informes y análisis de los resultados	24	2	Parcial  Informes de las prácticas computacionales

	<b>Contenidos Programáticos Programas de Pregrado</b>	<b>Código</b>	FGA-23 v.03
		<b>Página</b>	9 de 13

### UNIDAD No. 3

**NOMBRE DE LA UNIDAD: DINÁMICA MOLECULAR.**

#### COMPETENCIAS A DESARROLLAR

CONTENIDOS	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL PROFESOR	HORAS CONTACTO DIRECTO	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL ESTUDIANTE	HORAS TRABAJO INDEPENDIENTE	HORAS ACOMPAÑAMIENTO AL TRABAJO INDEPENDIENTE	ESTRATEGÍAS DE EVALUACIÓN QUE INCLUYA LA EVALUACIÓN DEL TRABAJO INDEPENDIENTE
<p>Generalidades sobre la dinámica molecular: historia, avances, dinámica molecular y muestre Monte Carlo.</p> <p>Ecuaciones de movimiento en dinámica molecular, cálculo de fuerzas, aceleración y posiciones atómicas.</p> <p>Algoritmos y programas computacionales basados en dinámica molecular: introducción a Gromacs.</p> <p>Practica 3: simulación mediante dinámica molecular del carvacrol en fase gaseosa y obtención de propiedades estructurales y energéticas.</p>	<p>Preparación de clases</p> <p>Clase magistral presentando los temas propuestos</p> <p>Proposición de lecturas de artículos de revisión relacionados con el tema</p> <p>Preparación de los protocolos necesarios para desarrollar las prácticas computacionales propuestas</p>	8	<p>Lecturas propuestas por el profesor</p> <p>Desarrolla las prácticas propuestas en la unidad</p> <p>Entrega de informes y análisis de los resultados</p>	16	2	<p>Parcial</p> <p>Informes de las prácticas computacionales</p>



## Contenidos Programáticos Programas de Pregrado

Código

FGA-23 v.03

Página

10 de 13

### UNIDAD No. 4

#### NOMBRE DE LA UNIDAD: CÁLCULOS DE PROPIEDADES CON DINÁMICA MOLECULAR.

#### COMPETENCIAS A DESARROLLAR

CONTENIDOS	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL PROFESOR	HORAS CONTACTO DIRECTO	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL ESTUDIANTE	HORAS TRABAJO INDEPENDIENTE	HORAS ACOMPAÑAMIENTO AL TRABAJO INDEPENDIENTE	ESTRATEGÍAS DE EVALUACIÓN QUE INCLUYA LA EVALUACIÓN DEL TRABAJO INDEPENDIENTE
Generalidades.  Propiedades estructurales, energéticas y de transporte a partir de simulaciones de dinámica molecular.  Practica 4: dinámica molecular y obtención de propiedades estructurales y de transporte de solventes orgánicos. Caso de estudio: solventes orgánicos como hexano, heptano, butanol y propanol.	Preparación de clases  Clase magistral presentando los temas propuestos  Proposición de lecturas de artículos de revisión relacionados con el tema  Preparación de los protocolos necesarios para desarrollar las prácticas computacionales propuestas	8	Lecturas propuestas por el profesor  Desarrolla las prácticas propuestas en la unidad  Entrega de informes y análisis de los resultados	16	2	Parcial  Informes de las prácticas computacionales



## Contenidos Programáticos Programas de Pregrado

Código

FGA-23 v.03

Página

11 de 13

### UNIDAD No. 5

### NOMBRE DE LA UNIDAD: ACOPLAMIENTO MOLECULAR.

### COMPETENCIAS A DESARROLLAR

CONTENIDOS	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL PROFESOR	HORAS CONTACTO DIRECTO	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL ESTUDIANTE	HORAS TRABAJO INDEPENDIENTE	HORAS ACOMPAÑAMIENTO AL TRABAJO INDEPENDIENTE	ESTRATEGÍAS DE EVALUACIÓN QUE INCLUYA LA EVALUACIÓN DEL TRABAJO INDEPENDIENTE
Introducción al acoplamiento molecular: generalidades, impacto en el estudio de proteínas y receptores, ejemplos, funciones de puntuación.  Programas computacionales basados en cálculos de acoplamiento molecular.  Practica 5: estudio de las interacciones proteína-ligando de un sistema de referencia. Caso de estudio: acoplamiento molecular entre la proteína humana adiposo de ácido graso (PDB: 2NNQ) en complejo con el ácido ((2'-(5-etil-3,4-difenil-1H-pirazol-1-il)-3-bifenilil)oxi) acético.	Preparación de clases  Clase magistral presentando los temas propuestos  Proposición de lecturas de artículos de revisión relacionados con el tema  Preparación de los protocolos necesarios para desarrollar las prácticas computacionales propuestas	8	Lecturas propuestas por el profesor  Desarrolla las prácticas propuestas en la unidad  Entrega de informes y análisis de los resultados	16	2	Parcial  Informes de las prácticas computacionales



## Contenidos Programáticos Programas de Pregrado

Código

FGA-23 v.03

Página

12 de 13

### UNIDAD No. 6

### NOMBRE DE LA UNIDAD: ACOPLAMIENTO MOLECULAR Y DINÁMICA MOLECULAR.

### COMPETENCIAS A DESARROLLAR

CONTENIDOS	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL PROFESOR	HORAS CONTACTO DIRECTO	ACTIVIDADES A DESARROLLAR POR EL ESTUDIANTE	HORAS TRABAJO INDEPENDIENTE	HORAS ACOMPAÑAMIENTO AL TRABAJO INDEPENDIENTE	ESTRATEGÍAS DE EVALUACIÓN QUE INCLUYA LA EVALUACIÓN DEL TRABAJO INDEPENDIENTE
Generalidades.  Propiedades estructurales, energéticas y dinámicas en estudios de acoplamiento molecular en combinación con dinámica molecular.  Practica 6: Estudio de la estabilidad del complejo entre la proteína humana adiposito de ácido graso (PDB: 2NNQ) y el ácido ((2'-(5-etil-3,4-difenil-1H-pirazol-1-il)-3-bifenilil)oxi) acético.	Preparación de clases  Clase magistral presentando los temas propuestos  Proposición de lecturas de artículos de revisión relacionados con el tema  Preparación de los protocolos necesarios para desarrollar las prácticas computacionales propuestas	8	Lecturas propuestas por el profesor  Desarrolla las prácticas propuestas en la unidad  Entrega de informes y análisis de los resultados	16	2	Parcial  Informes de las prácticas computacionales