

**FICHA IDENTIFICATIVA****DATOS DE LA ASIGNATURA****Código:** 44709**Nombre:** Química orgánica computacional**Ciclo:** Máster Universitario Oficial**Créditos ECTS:** 4**Curso académico:** 2026-27**TITULACIONES**

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

MATERIAS

Titulación	Materia	Carácter
2226 - M.U. en Química Orgánica	Química orgánica computacional	OBLIGATORIA

COORDINACIÓN

ESCORIHUELA FUENTES JORGE

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 / RESULTADOS DE APRENDIZAJE



2226 - M.U. en Química Orgánica

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.

CB10 - Poseer las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.

CB7 - Saber 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.

CB8 - Ser 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.

CB9 - Saber 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

Competencias de gestión tales como la capacidad para la planificación y gestión de tiempo y recursos, así como para dirigir y tomar decisiones.

Conocer las bases químicas para el diseño racional de fármacos mediante la utilización de técnicas computacionales y de modelado molecular.

CT1 - Ser capaces de acceder a herramientas de información en otras áreas del conocimiento y utilizarlas apropiadamente.

Poseer habilidades sociales, un buen nivel de comunicación oral y escrita, así como capacidad para trabajar en equipo y con personas de diferentes procedencias.

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.

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.

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.

Utilizar las distintas técnicas de exposición -oral, escrita, presentaciones, paneles, etc- para comunicar sus conocimientos, propuestas y posiciones.

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. Métodos de la teoría del funcional de la densidad (DFT). Exploración de superficies de energía potencial: mínimos de energía y estados de transición. Mecanismos de reacción. Propiedades electrónicas. Propiedades termodinámicas. Modelos de solvatación.

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 (HORAS)

ACTIVIDADES PRESENCIALES

Actividad	Horas
Teoría	20,00
Seminario	20,00
Total horas	40,00

ACTIVIDADES NO PRESENCIALES

Actividad	Horas
Asistencia a otras actividades	0,00
Elaboración de trabajos individuales o en grupo	10,00
Estudio y trabajo autónomo	40,00
Preparación de clases	0,00
Preparación de actividades de evaluación	10,00
Resolución de casos prácticos	0,00
Total horas	60,00

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

La evaluación de la asignatura se llevará a cabo a través de una combinación de pruebas escritas, trabajos individuales y presentaciones orales, con el objetivo de evaluar tanto los conocimientos teóricos como las habilidades prácticas de los estudiantes. Los criterios de evaluación y ponderaciones serán los siguientes:

Examen de opción múltiple (60%).

Se realizará un examen escrito en forma de cuestionario, que incluye preguntas de opción múltiple. El objetivo de este examen es evaluar la comprensión por parte de los estudiantes de los contenidos teóricos tratados a lo largo del curso.

Entrega de un informe (20%).

Los estudiantes deberán redactar y entregar un informe en el que apliquen los conocimientos adquiridos, elaborando un análisis crítico o una propuesta práctica relacionada con la materia.

Presentación oral de trabajos publicados (20%).

Los estudiantes deben seleccionar un trabajo académico publicado o un artículo relacionado con el tema y realizar una presentación oral sobre el mismo. La presentación se evaluará en función de la capacidad de síntesis, la claridad de la exposición, el dominio del tema y la capacidad de responder preguntas.

Para superar la asignatura, los estudiantes deben obtener una puntuación mínima de 4 sobre 10 en cada uno de los tres componentes y una media ponderada de al menos 5 sobre 10.

En la segunda convocatoria no será recuperable el apartado de evaluación directa del profesor.

p>

BIBLIOGRAFÍA

- Frank Jensen, Introduction to Computational Chemistry, 3rd Edition, John Wiley & Sons, Inc.,



2016.

- Christopher J. Cramer, Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models, 2nd Edition, John Wiley & Sons, Inc., 2004
 - David C. Young. Computational Drug Design. A Guide for Computational and Medicinal Chemists, John Wiley & Sons, Inc., 2009.
 - Andrew R. Leach, Molecular Modelling, Principles and Applications, 2nd Edition, Pearson, Prentice, Hall, 2001.
 - Guy H. Grant, W. Graham Richards, Computational Chemistry. Oxford University Press, 1996.
 - Steven M. Bachrach. Computational Organic Chemistry. Wiley-Blackwell. 2007.
-
- 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>