

**FITXA IDENTIFICATIVA****DADES DE L'ASSIGNATURA**

Codi: 44709
Nom: Química orgànica computacional
Cicle: Màster Universitari Oficial
Crèdits ECTS: 4
Curs acadèmic: 2025-26

TITULACIONS

Titulació	Centre	Curs	Període
2226 - Màster Universitari en Química Orgànica	Facultat de Química	1	Anual

MATÈRIES

Titulació	Matèria	Caràcter
2226 - Màster Universitari en Química Orgànica	Química orgànica computacional	OBLIGATÒRIA

COORDINACIÓ

ESCORIHUELA FUENTES JORGE

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'interès en el disseny racional de fàrmacs.

CONEIXEMENTS PREVIS**RELACIÓ AMB ALTRES ASSIGNATURES DE LA MATEIXA TITULACIÓ**

No s'ha especificat 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 / RESULTATS D' APRENENTATGE**2226 - Màster Universitari en Química Orgànica**



Ampliar els conceptes bàsics en què es recolzen les diferents tècniques computacionals, especialment aquelles emprades en Química Orgànica com a eines útils en estudis de propietats químiques i estudis mecanístics.

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.

Conèixer les bases químiques per al disseny racional de fàrmacs per mitjà de la utilització de tècniques computacionals i de modelatge molecular.

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.

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.

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.

Que els estudiants sàpiguin 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 sàpiguin 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 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.

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.

Ser capaços d'accedir a eines d'informació en altres àrees del coneixement i utilitzar-les apropiadament.

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.

Utilitzar les diferents tècniques d'exposició-oral, escrita, presentacions, panells, etc-per comunicar els seus coneixements, propostes i posicions.

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. Mètodes de la teoria del funcional de la densitat (DFT). Homologació de superfícies d' energia potencial: mínims d' energia i estats de transició. Mecanismes de reacció. Propietats electròniques. Propietats termodinàmiques. Models de solvatació.

3. Mecànica Molecular

Mecànica Molecular. Camps 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 lligand-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-lligand, docking proteïna-lligand i proteïna-proteïna, garbellat virtual. Disseny de fàrmacs basat en el lligand: QSAR-2D, *QSAR-3D, farmacòfors. 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 lligand-receptor. Docking proteïna-lligand 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 (HORES)

ACTIVITATS PRESENCIALS

Activitat	Hores
Teoria	20,00
Seminari	20,00
Total hores	40,00

ACTIVITATS NO PRESENCIALS

Activitat	Hores
Assistència a altres activitats	0,00
Elaboració de treballs individuals o en grup	10,00
Estudi i treball autònom	40,00
Preparació de classes	0,00
Preparació d'activitats d'avaluació	10,00
Resolució de casos pràctics	0,00
Total hores	60,00

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

L'avaluació de l'assignatura es durà a terme a través d'una combinació de proves escrites, treballs individuals i presentacions orals, amb l'objectiu d'avaluar tant els coneixements teòrics com les habilitats pràctiques dels estudiants. Els criteris d'avaluació i ponderacions seran els següents:

Examen d'opció múltiple (60%).

S'administrarà un examen escrit en forma de qüestionari, que inclou preguntes d'opció múltiple. L'objectiu d'aquest examen és avaluar la comprensió per part dels estudiants dels continguts teòrics tractats al llarg del curs.

Lliurament d'un informe (20%).

Els estudiants hauran de redactar i lliurar un informe en el qual apliquin els coneixements adquirits, elaborant una anàlisi crítica o una proposta pràctica relacionada amb la matèria.

Presentació oral de treballs publicats (20%).

Els estudiants han de seleccionar un treball acadèmic publicat o un article relacionat amb el tema i fer-ne una presentació oral. La presentació s'avaluarà en funció de la capacitat de síntesi, la claredat de l'exposició, el domini del tema i la capacitat de respondre preguntes.

Per superar l'assignatura, els estudiants han d'obtenir una puntuació mínima de 4 sobre 10 en cadascun dels tres components i una mitjana ponderada d'almenys 5 sobre 10.

BIBLIOGRAFIA

- 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>