Ministerio de Cultura y Educación
Universidad Nacional de San Luis
Facultad de Química Bioquímica y Farmacia
Departamento: Quimica
Area: Quimica Fisica

(Programa del año 2025)
(Programa en trámite de aprobación)
(Presentado el 25/06/2025 09:28:55)

I - Oferta Académica

Materia	Carrera	Plan	Año	Período
INTRODUCCIÓN AL MODELADO MOLECULAR DE SISTEMAS ORGÁNICOS Y BIORGÁNICOS	LIC. EN QUIMÍCA	12/21	2025	1° cuatrimestre

II - Equipo Docente

Docente	Función	Cargo	Dedicación
SANCHO, MATIAS ISRAEL	Prof. Responsable	P.Asoc Exc	40 Hs
BALDONI, HECTOR ARMANDO	Prof. Colaborador	P.Tit. Exc	40 Hs
DAVILA, YAMINA ANDREA	Prof. Colaborador	P.Adj Exc	40 Hs
MUÑOZ, VANESA ALEJANDRA	Responsable de Práctico	JTP Exc	40 Hs

III - Características del Curso

Credito Horario Semanal				
Teórico/Práctico	Teóricas	Prácticas de Aula	Práct. de lab/ camp/ Resid/ PIP, etc.	Total
Hs	2 Hs	2 Hs	Hs	4 Hs

Tipificación	Periodo
C - Teoria con prácticas de aula	1º Cuatrimestre

Duración			
Desde	Hasta	Cantidad de Semanas	Cantidad de Horas
12/03/2025	24/06/2025	15	60

IV - Fundamentación

La asignatura Introducción al modelado molecular de sistemas orgánicos y biológicos, tiene la finalidad de contribuir a una sólida formación del egresado de la carrera de Licenciatura en Química (Ord. CD 12/21), es por ello que se desarrollan en forma teórica y práctica, temas vinculados a metodologías propias de la mecánica clásica y la mecánica cuántica y su aplicación en el estudio de sistemas químicos y biológicos. El aprendizaje de estos conocimientos y su aplicación, se consideran necesarios para la formación profesional del egresado. De esta forma, la asignatura se plantea como dos módulos: Moléculas orgánicas pequeñas y Sistemas biológicos. En cada uno de los ejes se incorporan generalidades del formalismo propio de los temas a abordar y las prácticas computacionales específicas a su aplicación. Este curso, es llevado a cabo en forma transversal al área de Química Física y de Química General e Inorgánica.

V - Objetivos / Resultados de Aprendizaje

- Introducir al estudiante de la carrera Licenciado Química en el estudio de la Química Computacional.
- Aprender de forma integral los principios conceptuales básicos necesarios para el modelado molecular por métodos computacionales.
- Aplicar los conocimientos adquiridos en el curso a sistemas químicos y biológicos de interés científico y social.

VI - Contenidos

MÓDULO I: MOLÉCULAS ORGÁNICAS PEQUEÑAS

Tema 1

Átomos. Introducción. Conceptos previos a la Mecánica Cuántica. Radiación de cuerpo negro. Efecto fotoeléctrico. Principio de indeterminación de Heisemberg. La ecuación de Schrödinger. El Hamiltoniano atómico. El átomo de Hidrógeno. Orbitales. Tratamiento atómico mono y polielectrónico. Correlación electrónica. Moléculas. El Hamiltoniano molecular. La aproximación de Born-Oppenheimer. Restricciones sobre la función de onda.

Tema 2

El principio variacional. Método de Hartree. Ecuaciones integro-diferenciales. Procedimiento SCF. Determinante de Slater. Método de Hartree-Fock. Orbitales moleculares (OM), combinación lineal de orbitales atómicos CLOA. Ecuaciones de Roothan-Hall. Expresión matricial de las ecuaciones de Hartree-Fock. La energía de correlación. Métodos de interacción de configuraciones (CI). Conjunto de funciones de base. El error por superposición de bases (BSSE).

Tema 3

Métodos Semiempíricos. Criterio ZDO (Zero Differential Overlap). El método MNDO. Mejoras del MNDO: AM1 y PM3. Método PM6. Determinación de parámetros semiempíricos. Teorema de Hohenberg-Kohn. Ecuaciones de Kohn-Sham. El funcional de intercambio-correlación. Aproximaciones LDA, GGA y meta-GGA. Funcionales híbridos y doble-híbridos. Serie perturbativa Møller-Plesset. Métodos del tipo “coupled cluster”. Métodos multi configuraciones autoconsistentes.Tratamiento explícito e implícito del solvente. Campo de reacción autoconsistente (SCRF): método del continuo polarizable (PCM)

MÓDULO II: SISTEMAS BIOLÓGICOS

Tema 4

Mecánica clásica: métodos y fundamentos. Funciones de energía potencial clásica. Campo de fuerzas: elementos básicos. Descripción de campos de fuerza comunes. Mecánica molecular. Aplicaciones y uso de los campos de fuerza.

Tema 5

Simulación molecular: conceptos generales, fases del proceso y métodos de simulación. Análisis estructural y energético. Energía libre: estimaciones (MM-GBSA) y descomposición por residuo. Modelos reducidos y aplicaciones a biomoléculas.

VII - Plan de Trabajos Prácticos

Trabajo Práctico Introductorio

Uso de linux y programas de transferencia de archivos (SSH). Construcción de estructuras moleculares con ChemDraw y Chem3D. Manejo de programas de cálculo mecano-cuántico básicos (Gaussian 16). Construcción de archivos de entrada de cálculo e interpretación de archivos de salida (GaussView).

Trabajo Práctico N°1

Cálculos Hartree Fock. Análisis y construcción de matriz Z. Optimización de parámetros geométricos de sistemas moleculares y análisis conformacional de moléculas flexibles.

Trabajo Práctico N°2

Cálculo de frecuencias vibracionales. Análisis de espectros infrarrojos y asignación de bandas. Cálculo de magnitudes termodinámicas. Modelos de solvatación. Método del Orden Natural de Enlace (NBO).

Trabajo Práctico N°3

Visualización de orbitales moleculares canónicos. Cálculo de espectros de absorción UV-Visible, métodos de la Teoría del Funcional de la Densidad (TD-DFT). Interpretación de las transiciones electrónicas. Cálculo de espectros de Resonancia Magnética Nuclear (método GIAO)

Trabajo Práctico N°4
Funciones de Fukui. Evaluación de la naturaleza de las interacciones inter e intramoleculares. Método Cuántico de Átomos en Moléculas (QTAIM).

Trabajo Práctico N°5
Construcción del sistema modelo: Campos de fuerzas para proteínas, lípidos, ácidos nucleicos y carbohidratos. Construcción de sistemas de proteínas en agua explícita. Simulación de un cristal de proteína.

Trabajo Práctico N°6
Desarrollo de parámetros: Campo de fuerza generalizados. Parametrización de compuestos farmacéuticos, cofactores y ligandos. Configuración de un sistemas receptor-ligando. Modelado de iones metálicos. Derivación de cargas atómicas polarizadas. Derivación de parámetros de campos de fuerza personalizados.
Ejecución de la dinámica: Equilibración energética y térmica del sistema modelo.

Trabajo Práctico N°7
Análisis de trayectorias: Análisis energético y estructural. Introducción al Análisis de Componentes Principales. Cauterización de trayectorias. Análisis de interacciones intra- e intermoleculares. Energía libre de asociación: Mecánica molecular con un solvente de Poisson-Boltzmann/área superficial. Estimación de energía libre. Cálculo de los valores de entalpía de unión. Cálculos de energía libre con Free Energy Workflow (FEW). Cálculo de la energía libre de enlace mediante el método de conexión, extracción y liberación (APR).

VIII - Regimen de Aprobación

Para regularizar esta asignatura, los estudiantes deberán asistir al 80% de las clases teórico-prácticas, aprobar la totalidad de los trabajos prácticos y los parciales correspondientes. La asignatura es de carácter promocional, en donde además de las condiciones para regularizarla, es necesaria la aprobación de:
1- Un coloquio sobre los contenidos teóricos de la asignatura.
2- La presentación de un informe escrito que describa de forma clara y fundamentada las tareas realizadas y los resultados alcanzados. Si dicho informe demuestra ser suficientemente sólido, coherente y refleja una comprensión profunda del trabajo, se considerará que cumple con los objetivos evaluativos. Se podrá requerir un coloquio adicional en el caso que el informe no cumpla con las condiciones descriptas previamente.

IX - Bibliografía Básica

[1] Ideas of Quantum Chemistry, L. Piela, Elsevier, 2ª Ed, UK, 2014.
[2] Química Cuántica, I. Levine, Ed Prentice Hall, 5ª ED, 2001.
[3] Química Física, P.W. Atkins, J. de Paula, Ed Panamericana, 2008.
[4] Innovations in Biomolecular Modeling and Simulations Volume 2, Ed. T. Schlick, RSC Biomolecular Sciences Nº 24, ISBN: 978-1-84973-462-2, 2012.
[5] Advances in Protein Chemistry and Structural Biology Volume 96: Biomolecular modelling and simulations, T. Karabencheva-Christova, Academic Press/Elsevier, ISBN 978-0-12-800013-7,2014.
[6] Biomolecular Simulations: Methods and Protocols, M. Bonomi and C. Camilloni, Humana press, ISBN 978-1-4939-9607-0, 2022.
[7] Amber 2022 reference manual (comprised of AmberTools22 and Amber22), D.A. Case et al., Amber 2022, University of California, San Francisco.
[8] Molecular Dynamics: Studies of Synthetic and Biological Macromolecules, Ed: L. Wang, INTECH Open science, ISBN: 978-953-51-0444-4, 2012.
[9] Biomolecular Simulations in Structure-Based Drug Discovery, F.L. Gervasio and V. Spiwok, Wiley-VCH, ISBN 978-3-527-34265-5, 2019.

X - Bibliografia Complementaria

[1] Gaussian 16 Users Reference Manual. Versión online https://gaussian.com/man/

[2] Lewandowski W, Lewandowska H, Golonko A, Swiderski G, Swislocka R, Kalinowska M. (2020) Correlations between molecular structure and biological activity in "logical series" of dietary chromone derivatives. PLoS ONE 15(8): e0229477.
[3] Anders S. Christensen,Tomas Kubar,Qiang Cui, and Marcus Elstner (2016). Semiempirical Quantum Mechanical Methods for Noncovalent Interactions for Chemical and Biochemical Applications. Chem. Rev. 116, 5301-5337.
[4] Davila, Y, Sancho M, Almandoz M.C., Gasull, E. (2018) Spectroscopic and Electronic Analysis of Chelation Reactions of Galangin and Related Flavonoids with Nickel(II). J. Chem. Eng. Data 63, 1488-1497.

XI - Resumen de Objetivos

Introducir al estudiante de la carrera Licenciado Química en el estudio de la Química Computacional.

Aprender de forma integral los principios conceptuales básicos necesarios para el modelado molecular por métodos computacionales.

Aplicar los conocimientos adquiridos en el curso a sistemas químicos y biológicos de interés científico y social.

XII - Resumen del Programa

-Tema 1: Introducción a la mecánica cuántica
-Tema 2: Método Variacional (Hartree-Fock)
-Tema 3: Métodos Post Hartree-Fock
-Tema 4: Métodos de la mecánica clásica y mecánica molecular
-Tema 5: Simulación de sistemas moleculares

XIII - Imprevistos

Los imprevistos como así también las situaciones no contempladas en el presente programa, serán resueltos con las aplicaciones de las normativas vigentes para la Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia y la Universidad Nacional de San Luis, en cada caso en particular.

XIV - Otros

ELEVACIÓN y APROBACIÓN DE ESTE PROGRAMA	
	Profesor Responsable
Firma:	
Aclaración:	
Fecha:	