

	<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>	84 créditos	<b>CORREQUISITO:</b>	
<b>CRÉDITOS:</b>	2	<b>TIPO DE CURSO:</b>	Teórico-Práctico
<b>FECHA ÚLTIMA ACTUALIZACIÓN</b>	Marzo de 2023		

#### **JUSTIFICACIÓN**

La química computacional engloba un conjunto vasto 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

1. 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.
2. Recocer las diferencias entre mecánica clásica, dinámica molecular y mecánica cuántica.
3. Capacidad para la obtención de datos mínimos basados en la mecánica clásica para la descripción de sistemas atómicos/moleculares.
4. Adquirir las definiciones teóricas respecto a la programación en Química
5. Comparar y contrastar diferentes métodos para la resolución mediante métodos computacionales en las diferentes áreas de Química

### COMPETENCIAS

- ✓ Conocimientos básicos sobre programación en Química usando Python
- ✓ Conocimientos básicos sobre métodos mecano-cuánticos para la obtención teórica de propiedades moleculares
- ✓ 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 PROGRAMACIÓN EN QUÍMICA

TEMA	HORAS DE CONTACTO DIRECTO	HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE
Introducción a la programación en Química	2	4
Comandos básicos y estructuras de datos del lenguaje de programación Python, resolución de problemas en química computacionalmente y desarrollo de un pensamiento algorítmico relacionado con problemas de química	2	2
Desarrolló de scripts para realizar tareas complejas que involucren diferentes programas y comandos del sistema operativo. Caso estudio: Chempy	4	8

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

## UNIDAD 2: SISTEMAS OPERATIVOS Y METODOS NÚMERICOS.

TEMA	HORAS DE CONTACTO DIRECTO	HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE
Introducción a las herramientas básicas en Linux para el tratamiento de datos.	2	2
Familiarización con los elementos básicos de sistemas operativos UNIX/Linux en la línea de comandos.	2	2
Algoritmos básicos necesarios para formular numéricamente problemas físico-matemáticos.	4	8
Resolución de sistemas lineales por métodos iterativos.	4	8

## EVALUACIÓN – PRIMER CORTE

### UNIDAD 3: INTRODUCCIÓN A LA QUÍMICA CUÁNTICA COMPUTACIONAL

TEMA	HORAS DE CONTACTO DIRECTO	HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE
Generalidades sobre la química cuántica computacional: historia, avances, y aplicaciones	1	2
Introducción a los métodos de cálculo de la estructura molecular: Mecánica Molecular, métodos aproximados, métodos "ab initio"(La aproximación de Hartree-Fock), teoría del funcional de la densidad (DFT).	1	2
Estructura y enlaces químicos, orbitales, teoría del enlace químico, electronegatividad, momentos dipolares, Cargas formales, bases y ácidos, Interacciones no covalentes	2	4
Revisión de los conceptos de carga y multiplicidad. Revisión de los cálculos de optimización global y frecuencias vibraciones.	4	8

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

#### UNIDAD 4: APLICACIONES A LA ESPECTROSCOPIA.

TEMA	HORAS DE CONTACTO DIRECTO	HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE
Análisis de las energías de los orbitales frontera HOMO y LUMO, estudio del concepto de potencial electrostático molecular, MEP.	2	4
Cálculo del espectro: UV-VIS, INFRARROJA (FTIR) y RAMAN por medio computacional	2	4
Practica 2: Estudios de complejación de NO <sub>3</sub> , NO <sub>2</sub> , CO <sub>2</sub> y N <sub>2</sub> con la molécula de calix[4]areno; Estudio de propiedades moleculares del glifosato usando métodos químico-cuánticos computacionales	4	8


#### EVALUACIÓN – SEGUNDO CORTE

##### UNIDAD 5: ACOPLAMIENTO MOLECULAR (DOCKING).

TEMA	HORAS DE CONTACTO DIRECTO	HORAS DE TRABAJO INDEPENDIENTE DEL ESTUDIANTE
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 3: acoplamiento molecular de proteína EPSPS (5-enol-piruvil shikimato-3-fosfato sintasa) con glifosato	4	8

##### UNIDAD 6: CAMPOS DE FUERZAS EN SISTEMAS ATÓMICOS/MOLECULARES Y DINÁMICA MOLECULAR.

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

	<b>Contenidos Programáticos Programas de Pregrado</b>	<b>Código</b>	FGA-23 v.03
		<b>Página</b>	5 de 13
Obtención de parámetros de campo de carvacol			
Generalidades sobre la dinámica molecular: historia, avances, dinámica molecular	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>	6 de 13

La metodología desarrollada pretender calificar los resultados de aprendizaje del estudiante frente al conocimiento crítico y el análisis de la información recibida en los diferentes temas. Los resultados de aprendizaje establecidos por el Programa de Química son:

**RAP1.** Desarrollar procesos de comunicación efectiva y asertiva de resultados mediante informes orales, escritos y/o electrónicos respetando los derechos de autor. Este se evalúa mediante la presentación de informes de laboratorio, exposiciones de un tema específico y ensayos.

**RAP2.** Presentar informes técnico-científicos de laboratorio demostrando el cumplimiento de la normatividad ambiental, los estándares de calidad en los procedimientos y las medidas asociadas a ellos, riesgos profesionales, éticos y trabajo en grupo. Este se evalúa mediante el desempeño durante la realización de las prácticas de laboratorio, presentación de preinformes y diagramas de flujo previos, los informes escritos de los mismos y presentación de los proyectos de aula.

**RAP3.** Desarrollar metodologías de transferencia de conceptos y/o datos para la solución de problemas en el área de las ciencias naturales. Evaluado por medio de la utilización e implementación de software especializados, procesamiento y análisis de datos.

#### **SISTEMA DE EVALUACIÓN**

##### **Primer corte:**

20% Evaluación; 15% Informes, Quices y Talleres

##### **Segundo corte:**

20% Evaluación; 15% Informes, Quices y Talleres

##### **Tercer corte:**

20% Evaluación; 10% Informes, Quices y Talleres

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

1. Levine I., Físicoquímica, 5ª 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**

	<b>Contenidos Programáticos Programas de Pregrado</b>	<b>Código</b>	FGA-23 v.03
		<b>Página</b>	7 de 13

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>	8 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 PROGRAMACIÓN EN QUÍMICA**

**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 a la programación en Química	Preparación de clases Clase magistral presentando los temas propuestos		Lecturas propuestas por el profesor			
Comandos básicos y estructuras de datos del lenguaje de programación Python Resolución de problemas en química computacionalmente, desarrollo de un pensamiento algorítmico relacionado con problemas de química	Proposición de lecturas de artículos de revisión relacionados con el tema Preparación de los protocolos necesarios para desarrollar las practicas computacionales propuestas	8	Desarrollas las practicas propuestas en la unidad Entrega de informes y análisis de los resultados	16	2	Parcial Informes de las practicas computacionales
Desarrolló de scripts para realizar tareas complejas que involucren diferentes programas y comandos del sistema operativo. Caso estudio: Chempy						



**Contenidos Programáticos Programas de Pregrado**

**Código**

FGA-23 v.03

**Página**

7 de 13

**UNIDAD No. 2**

**NOMBRE DE LA UNIDAD: SISTEMAS OPERATIVOS Y METODOS NUMERICOS.**

**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>Introducción a las herramientas básicas en Linux para el tratamiento de datos.</p> <p>Familiarización con los elementos básicos de sistemas operativos UNIX/Linux en la línea de comandos.</p> <p>Algoritmos básicos necesarios para formular numéricamente problemas físico-matemáticos.</p> <p>Resolución de sistemas lineales por métodos iterativos.</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 practicas computacionales propuestas</p>	12	<p>Lecturas propuestas por el profesor</p> <p>Desarrollas las practicas propuestas en la unidad</p> <p>Entrega de informes y análisis de los resultados</p>	24	2	<p>Parcial</p> <p>Informes de las practicas computacionales</p>



**Contenidos Programáticos Programas de Pregrado**

**Código**

FGA-23 v.03

**Página**

7 de 13

**UNIDAD No. 3**

**NOMBRE DE LA UNIDAD: INTRODUCCIÓN A LA QUÍMICA CUANTICA 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
Generalidades sobre la química cuántica computacional: historia, avances, y aplicaciones  Introducción a los métodos de cálculo de la estructura molecular: Mecánica Molecular, métodos aproximados, métodos "ab initio"(La aproximación de Hartree-Fock), teoría del funcional de la densidad (DFT).  Estructura y enlaces químicos, orbitales, teoría del enlace químico, electronegatividad, momentos dipolares, Cargas formales, bases y ácidos, Interacciones no covalentes  Revisión de los conceptos de carga y multiplicidad.	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 practicas computacionales propuestas	8	Lecturas propuestas por el profesor  Desarrollas las practicas propuestas en la unidad  Entrega de informes y análisis de los resultados	16	2	Parcial  Informes de las practicas computacionales



**Contenidos Programáticos Programas de Pregrado**

**Código**

FGA-23 v.03

**Página**

7 de 13

y los cálculos de optimización global y frecuencias vibracionales.

--

--

--

--

--

--



**Contenidos Programáticos Programas de Pregrado**

**Código**

FGA-23 v.03

**Página**

7 de 13

**UNIDAD No. 4**

**NOMBRE DE LA UNIDAD: APLICACIONES A LA ESPECTROSCOPIA.**

**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>Análisis de las energías de los orbitales frontera HOMO y LUMO, estudio del concepto de potencial electrostático molecular, MEP, cálculo de la isosuperficie del MEP, y termoquímica</p> <p>Cálculo del espectro: UV-VIS, INFRARROJO (FTIR) y RAMAN por medio computacional</p> <p>Práctica 1: Estudios de complejación de NO<sub>3</sub>, NO<sub>2</sub>, CO<sub>2</sub> y N<sub>2</sub> con la molécula de calix[4]areno</p> <p>Practica 2: Estudio de propiedades moleculares del glifosato usando métodos químicos-cuánticos computacionales</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 practicas computacionales propuestas</p>	8	<p>Lecturas propuestas por el profesor</p> <p>Desarrollas las practicas propuestas en la unidad</p> <p>Entrega de informes y análisis de los resultados</p>	16	2	<p>Parcial</p> <p>Informes de las practicas computacionales</p>



**Contenidos Programáticos Programas de Pregrado**

**Código**

FGA-23 v.03

**Página**

7 de 13

**UNIDAD No. 5**

**NOMBRE DE LA UNIDAD: ACOPLAMIENTO MOLECULAR(DOCKING).**

**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>Introducción al acoplamiento molecular: generalidades, impacto en el estudio de proteínas y receptores, ejemplos, funciones de puntuación.</p> <p>Programas computacionales basados en cálculos de acoplamiento molecular.</p> <p>Practica 3: acoplamiento molecular de proteína EPSPS (5-enol-piruvil shikimato-3-fosfato sintasa) con glifosato</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 practicas computacionales propuestas</p>	8	<p>Lecturas propuestas por el profesor</p> <p>Desarrollas las practicas propuestas en la unidad</p> <p>Entrega de informes y análisis de los resultados</p>	16	2	<p>Parcial</p> <p>Informes de las practicas computacionales</p>



**Contenidos Programáticos Programas de Pregrado**

**Código**

FGA-23 v.03

**Página**

7 de 13

**UNIDAD No. 6**

**NOMBRE DE LA UNIDAD: CAMPOS DE FUERZAS EN SISTEMAS ATÓMICOS/MOLECULARES 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
<p>Generalidades, funciones de energía potencial enlazantes y no enlazantes. Obtención de campos de fuerzas en sistemas atómicos moleculares.</p> <p>Practica 4: obtención de los campos de fuerza para moléculas orgánicas: usando CGenFF y AMBERTOOLS (AMBER ff). Obtención de parámetros de campo de carvacol</p> <p>Generalidades sobre la dinámica molecular: historia, avances, dinámica molecular</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 practicas computacionales propuestas</p>	8	<p>Lecturas propuestas por el profesor</p> <p>Desarrollas las practicas propuestas en la unidad</p> <p>Entrega de informes y análisis de los resultados</p>	16	2	<p>Parcial</p> <p>Informes de las practicas computacionales</p>