

Presidencia Roque Sáenz Peña, 12 de septiembre de 2024

RESOLUCIÓN N° 173/2024 - C.D.C.B. y A.

VISTO:

El Expediente N° 01-2023-07421 sobre Aprobación Programa Asignatura Electiva II: Introducción a la Química Computacional. - Carrera: Farmacia, iniciado por la Directora de Carrera. – Dra. Leonor, López Tévez; y

CONSIDERANDO:

Que la asignatura Electiva II: Introducción a la Química Computacional se dicta en el 5^{to} año 1^{er} cuatrimestre de la Carrera de Farmacia;

Que el Programa Analítico contempla los contenidos mínimos y la carga horaria propuestos en el Plan de estudios de la Carrera, aprobado por Resolución N° 31/17-C.S.;

Que los objetivos planteados guardan coherencia con los contenidos, métodos pedagógicos y de evaluación propuestos y la fundamentación refleja la relevancia de la asignatura en la formación de los futuros profesionales;

Que los Trabajos Prácticos son apropiados y la bibliografía propuesta es actualizada;

Lo aprobado en sesión de la fecha.

POR ELLO:

**EL CONSEJO DEPARTAMENTAL
DEL DEPARTAMENTO DE CIENCIAS BÁSICAS Y APLICADAS DE LA
UNIVERSIDAD NACIONAL DEL CHACO AUSTRAL
RESUELVE:**


ARTÍCULO 1°: APROBAR el Programa de la Asignatura Electiva II: Introducción a la Química Computacional de la Carrera de Farmacia, que como Anexo Único forma parte de la presente Resolución.

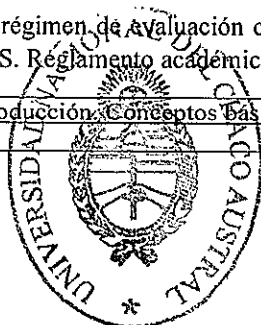
ARTÍCULO 2°: Regístrese, comuníquese, y archívese.



Nora B. Okun
Dra. Nora B. Okun
Directora
Dpto. de Cs. Básicas y Apl.

ANEXO
PROGRAMA DE ASIGNATURA

 UNCAUS UNIVERSIDAD NACIONAL DEL CHACO AUSTRAL		ELECTIVA II: INTRODUCCION A LA QUÍMICA COMPUTACIONAL Plan de Estudios Resolución N°31- 17 C.S.	
Carga Horaria: 50 horas Teóricas: 20 horas Prácticas: 30 horas		Programa vigente desde: 2024	
Carrera	Año	Cuatrimestre	
FARMACIA	5°	Primero	
CORRELATIVAS PRECEDENTES		CORRELATIVAS SUBSIGUIENTES	
Asignaturas		Asignaturas	
Para cursar		Para rendir	
Regularizadas	Aprobadas	Aprobadas	
Química Medicinal	Química Analítica II	-----	
DOCENTES:		Esp. Farm. TORRES, Esther Inés	
FUNDAMENTACIÓN:		Actualmente existe un interés y uso creciente en la industria farmacéutica de los métodos computacionales para el diseño y desarrollo de fármacos, lo que hace necesario incorporar esta disciplina con el fin de lograr desarrollar en los alumnos experiencia del conjunto de técnicas y herramientas en el área de la química computacional.	
OBJETIVOS:		Objetivo General: Conocer las herramientas informáticas englobadas bajo la denominación de técnicas de modelización molecular para avanzar en el conocimiento de la estructura tridimensional de las moléculas y las propiedades de las mismas que de ella se derivan. Objetivos específicos: -Familiarizarse con las herramientas de visualización y diseño de estructuras moleculares a través del uso de un Software libre. -Realizar diversos cálculos a las moléculas diseñadas usando base de datos del Programa empleando diferentes métodos del mismo.	
CONTENIDOS MÍNIMOS:		Conceptos básicos de modelado molecular. Conceptos básicos de Mecánica Molecular y Mecánica Cuántica.	
MÉTODOS PEDAGÓGICOS:		La metodología de la asignatura combina las clases teóricas con las clases prácticas con el uso del ordenador y software específico. Los alumnos asistirán en forma obligatoria, a una clase teórico-práctico semanal. Se empleará material audiovisual (cañón de proyección), que se completará con la explicación sobre la pizarra y/o retroproyector.	
MÉTODOS DE EVALUACIÓN:		Se ajustará al régimen de evaluación con examen final según Resolución N°080/12 – C.S. Reglamento académico de alumnos.	
		Unidad 1. Introducción. Conceptos básicos.	



///Res. N° 173/2024-DCByA.

<p>PROGRAMA ANALÍTICO DE CONTENIDOS:</p>	<p>Química Computacional: Definición y justificación. Modelos moleculares y visualización de moléculas. Introducción al programa libre.</p> <p>Unidad 2. <u>Mecánica Molecular MM y Campos de Fuerza</u> Construcción de Modelos por mecánica molecular. Concepto de Energía Potencial o Estérica. Los campos de fuerza., elección. Evaluación de sus propiedades.</p> <p>Unidad 3. <u>Mecánica Cuántica (QM)</u> La ecuación de Schödinger. El Hamiltoniano molecular. Aproximación de Born-Oppenheimer. La función de onda. Combinación Lineal de Orbitales Atómicos CLOA- OM. Cálculos Ab- Initio. Teoría de la Densidad Funcional (DFT). Métodos semiempíricos. Comparación de distintos métodos. Uso de un software libre.</p>
<p>PROGRAMA ANALÍTICO DE TRABAJOS PRÁCTICOS:</p>	<p>Trabajo Práctico N°1: Familiarización con el Programa libre. Gabinete de ejercitación de herramientas de visualización y diseño molecular. En laboratorio de informática, individual, 5 horas (Unidad 1).</p> <p>Trabajo Práctico N°2: Construcción de una molécula de mayor tamaño. Gabinete de ejercitación de diseño usando bases de datos del programa. En laboratorio de informática, individual, 5 horas (Unidad 1,2).</p> <p>Trabajo Práctico N°3: Mecánica Molecular. Gabinete de caracterización de la estructura de una molécula con MM. En laboratorio de informática, individual, 5 horas (Unidad 1,2).</p> <p>Trabajo Práctico N°4: Mecánica cuántica. Gabinete de caracterización de la estructura de una molécula con un método semiempírico. En laboratorio de informática, individual, 5 horas (Unidad 1,2,3).</p> <p>Trabajo Práctico N°5: Mecánica cuántica. Gabinete de optimización de la geometría de la estructura de una molécula con un método ab initio. En laboratorio de informática, individual, 5 horas (Unidad 1,2,3).</p> <p>Trabajo Práctico N°6: (P1, P3). Mecánica cuántica. Gabinete de ejercitación de cálculos y visualización de Orbitales moleculares de la estructura de una molécula diatómica con un método ab initio. En laboratorio de informática, individual, 5 horas (Unidad 1,2,3).</p>
<p>BIBLIOGRAFÍA:</p>	<p>1-Apuntes del Curso de Postgrado”. (2022). “Introducción al modelado molecular. Una herramienta de la Química Medicinal para el diseño de fármacos. Universidad Nacional de San Luis.</p> <p>2-Apuntes de Curso de Postgrado. (2005). “Química Teórica y Computacional”. Lab.de Química Teórica y Experimental-UTN-FRR</p> <p>3-Saldivar-González, F., Prieto-Martínez, F. D., & Medina-Franco, J. L. (2017). Descubrimiento y desarrollo de fármacos: un enfoque computacional. <i>Educación química</i>, 28(1), 51-58.</p> <p>4-Leach, A. R. (2001). <i>Molecular modelling: principles and applications</i>. Pearson education.</p> <p>5-Willett, P. (2007). A bibliometric analysis of the Journal of Molecular Graphics and Modelling. <i>Journal of Molecular Graphics and Modelling</i>, 26(3), 602-606</p>



Nora B. Oky
Dra. Nora B. Oky
Directora
Dpto. de Cs. Básicas y Apli