

MODELADO MOLECULAR

PROGRAMA

Energía potencial y estructura molecular: Superficies de energía potencial. Métodos clásicos y métodos cuánticos. La aproximación de Born-Oppenheimer. Algoritmos de muestreo de la superficie de energía potencial: cálculos puntuales, optimización de geometría y dinámica molecular.

Optimización de geometrías moleculares. Algoritmos de minimización de energía. Uso de gradientes analíticos, métodos de Polak-Ribiere y de Fletcher Reeves, método BFGS. Uso de la matriz Hessiana, métodos de Newton-Raphson y Newton-Raphson diagonalizado. Superficies de potencial con más de un mínimo. Búsqueda de estructuras de transición entre mínimos.

Métodos de la mecánica clásica: Mecánica molecular. Funciones de energía potencial clásica. Campo de fuerzas: elementos básicos. Descripción de los campos de fuerza más utilizados: MM2, MM3, CHARMM, OPLS, AMBER, DREIDING y UFF. Uso y aplicaciones.

Métodos de la mecánica cuántica: Solución aproximada de la ecuación de Schrödinger. Aproximación de electrones independientes. Orbitales moleculares y aproximación CLOA. Métodos de campo autoconsistente (SCF). Ecuaciones de Hartree-Fock. Sistemas de capa cerrada (RHF) y de capa abierta (UHF). Correcciones a la función de onda: interacción de configuraciones y métodos perturbativos (Moller-Plesset). Métodos *ab initio* y semiempíricos.

Cálculo de funciones de onda moleculares. Métodos *ab initio*. Funciones base para orbitales atómicos: Orbitales gaussianos y exponenciales (tipo Slater). Juegos de funciones base mínimos (STO-3G). Bases de valencia dividida. Funciones de polarización. Elección del juego de funciones base. Métodos semiempíricos. Métodos ZDO: CNDO, INDO, MINDO/3, ZINDO; métodos NDDO: MNDO, AM1, PM3, SAM1. Métodos para convergencia de campo autoconsistente. Determinación de propiedades moleculares. Predicción de espectros UV/visible e IR. Reactividad química. Aplicaciones.

Simulación de sistemas moleculares. Dinámica Molecular. Trayectorias clásicas en la superficie de energía potencial. Fases de una simulación de dinámica molecular. Dinámica de Langevin. Análisis de modos normales de oscilación. Simulaciones de Monte Carlo. Búsqueda conformacional. Ubicación del mínimo global. Congelamiento simulado. Aplicaciones a la búsqueda conformacional y a la simulación de biomoléculas.

Estudio de reacciones químicas. Caracterización de caminos de reacción. Análisis de trayectoria. Coordenada intrínseca de reacción y coordenada dinámica de reacción. Métodos de búsqueda de estados de transición. Aplicaciones.

Superficies moleculares. Modelos clásicos, esferas rígidas y superficies de Van der Waals. Superficies de densidad electrónica. Potencial electrostático molecular. Orbitales moleculares. Superficies accesibles por el solvente. Superficies de unión. Análisis de la forma de las superficies moleculares. Aplicaciones.

Diseño molecular asistido por computadora. Estrategias de diseño. Propiedades moleculares calculadas por la química computacional. Correlaciones estructura-actividad cuantitativas (QSAR). Aplicaciones.

BIBLIOGRAFIA.

"Molecular Modelling. Principles and Applications", A. Leach, Longmans, Londres (1996)

"Computational Chemistry: A Practical guide for applying techniques to real world problems" D. C. Young, Wiley & Sons, 2001

"Orbital Interaction theory of Organic Chemistry", 2nd Ed. A. Rauk, Wiley & Sons, 2001

"Molecular Mechanics", U. Burkert y N. L. Allinger, American Chemical Society Monograph 177, Washington DC (1982).

"Gaussian 09. User reference". E. Frisch, M.J. Frisch, F.R. Clemente & G.W. Trucks, Gaussian Inc, Wallingford (2009).

Artículos de revisión y manuales de los programas de modelado molecular utilizados.