

2.0.1994 (3)

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

U.B.A.

- 1.- DEPARTAMENTO/INSTITUTO: QUIMICA ORGANICA
- 2.- CARRERA DE: a) Licenciatura en:--- ORIENTACION:---
b) Doctorado y/o Postgrado en:QUIMICA
c) Profesorado en:---
d) Cursos Técnicos en Metereologia:---
e) Cursos de Idiomas:---
- 3.- 1er.CUATRIMESTRE Año: 1994
- 4.- N° DE CODIGO DE CARRERA: 51
- 5.- MATERIA: **MODELADO MOLECULAR** N° DE CODIGO: EN TRAMITE
- 6.- PUNTAJE PROPUESTO: 3 PUNTOS
- 7.- PLAN DE ESTUDIO Año: 1987
- 8.- CARACTER DE LA MATERIA :OPTATIVA
- 9.- DURACION : TRES SEMANAS
- 10.-HORAS DE CLASE SEMANAL:
a) Teóricas: d) Teórico-Seminarios: 30 Hs.
b) Problemas: 12 Hs. e) Teórico-problemas:
c) Laboratorio: f) Teórico-prácticas: 30 Hs.
g) Totales Horas: 72 Hs.
- 11.-CARGA HORARIA TOTAL: 72 HS.
- 12.-ASIGNATURAS CORRELATIVAS: ---
- 13.-FORMA DE EVALUACION: EXAMEN FINAL
- 14.-PROGRAMA ANALITICO: SE ADJUNTA

APROBADO POR RESOLUCION

ED 1268/94

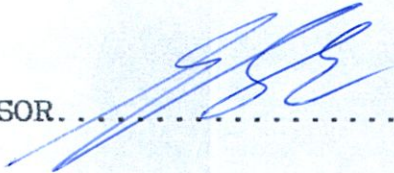
AS

15.-BIBLIOGRAFIA :

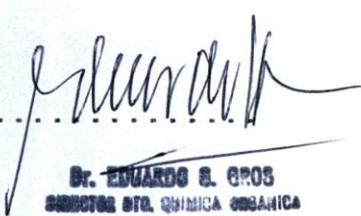
1. "A Computational Approach to Chemistry", D.M. Hirst, Blackwell Scientific Publications, Londres, 1990.
2. "Reviews in Computational Chemistry", K.B.Lipkowitz y D.B.Boyd, VCH Publishers Inc. Nueva York, 1990.
3. "Molecular Mechanics", U.Burkert y N.L.Allinger, American Chemical Society Monograph 177, Washington DC, 1982.

FECHA: 18 OCT 1993

FIRMA PROFESOR.....



FIRMA DIRECTOR.....



Dr. EDUARDO S. GROS
DIRECTOR DE QUIMICA ORGANICA

Aclaración firma..... Dr. GERARDO BURTON..... Sello aclaratorio.....

DENOMINACION DEL CURSO: MODELADO MOLECULAR

CARRERA: Doctorado en Química

RESPONSABLE: Dr. Gerardo Burton

FORMA DE EVALUACION: Examen Final

PROGRAMA

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

Mecánica molecular. Funciones de energía potencial. Campos de fuerza MM2, MM3, CHARMM, OPLS y AMBER.

Métodos *ab initio* para el cálculo de funciones de onda moleculares. Método de campo autoconsistente (SCF). Funciones base. Funciones gaussianas y exponenciales. Funciones de polarización. Elección del juego de funciones base.

Métodos semiempíricos de orbitales moleculares. CNDO, INDO, NDDO, MNDO, AM1, PM3. Métodos para convergencia de campo autoconsistente. Determinación de propiedades moleculares. Estudio de reacciones químicas.

Optimización de geometrías moleculares. Algoritmos de minimización de energía. Uso de gradientes analíticos, métodos de Polak-Ribiere y de Fletcher Reeves. 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. Búsqueda conformacional. Ubicación del mínimo global.

Dinámica Molecular. Trayectorias clásicas en la superficie de energía potencial. Fases de una simulación de dinámica molecular. Análisis de modos normales de oscilación. Método de Monte Carlo. Aplicaciones a la búsqueda conformacional y a la simulación de biomoléculas.

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.

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

GB

GB