



Universidad de Buenos Aires  
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Ref. Expte. N° 1519/2018

Ciudad Autónoma de Buenos Aires, **25 FEB 2019**

**VISTO**

La nota a foja 1 presentada por la Dirección del Departamento de Física, mediante la cual eleva la información del curso de posgrado **Simulaciones de Grano Grueso, Multiescala y el Campo de Fuerzas SIRAH**, para el año 2019.

**CONSIDERANDO**

Lo actuado por la Comisión de Doctorado,

Lo actuado por la Comisión de Posgrado,

Lo actuado por este Cuerpo en la sesión realizada en el día de la fecha,

En uso de las atribuciones que le confiere el Artículo 113° del Estatuto Universitario,

**EL CONSEJO DIRECTIVO DE LA FACULTAD DE  
CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES  
RESUELVE:**

**ARTÍCULO 1°:** Autorizar el dictado del nuevo curso de posgrado **Simulaciones de Grano Grueso, Multiescala y el Campo de Fuerzas SIRAH**, de 42 hs de duración, que será dictado por los Dres. Sergio Pantano y Mónica Pickholz.

**ARTÍCULO 2°:** Aprobar el programa del curso de posgrado **Simulaciones de Grano Grueso, Multiescala y el Campo de Fuerzas SIRAH**, obrante a fojas 4 (anverso y reverso) / 5 del expediente de referencia para su dictado del 11 al 28 de marzo de 2019.

**ARTÍCULO 3°:** Aprobar un puntaje máximo de dos (2) puntos para la Carrera del Doctorado.

**ARTÍCULO 4°:** Disponer que de no mediar modificaciones en el programa, la carga horaria y el arancel, el presente Curso de Posgrado tendrá una vigencia de cinco (5) años a partir de la fecha de la presente Resolución.

**ARTÍCULO 5°:** Comuníquese a todos los Departamentos Docentes, la Dirección de Estudiantes y Graduados, la Biblioteca de la FCEyN y la Secretaría de Posgrado, con fotocopia del programa incluido. Cumplido archívese.

**0103**

Resolución CD N° \_\_\_\_\_  
ga/ 14/02/2019

*[Faint handwritten signature]*

*[Handwritten signature]*  
Dr. JUAN CARLOS REBOREDA  
DECANO

**“Simulaciones de Grano Grueso, Multiescala y el Campo de Fuerzas SIRAH”**

**Sergio Pantano**

*Institut Pasteur de Montevideo, Uruguay*

**Propuesta de curso de posgrado: Carga horaria total: 42 hs.**

**Carga horaria de teoría: 18hs. (6 clases de 3hs cada una, Lunes y Miercoles de 14hs a 17hs)**

**Carga horaria de práctica: 24hs. (6 clases de 4hs cada una Martes y Jueves de 14 a 18hs)**

**Fecha propuesta: Del 11 al 28 de Marzo de 2019.**

**Programa propuesto para el curso:**

El programa esta dividido en dos módulos (teórico y práctico). Se espera que los estudiantes logren una comprensión completa de los conceptos básicos y logren aplicarlos a sistemas moleculares de su interés durante el modulo práctico.

Si bien el programa esta pensado para biomoléculas, los conceptos podrán ser aplicados a sistemas moleculares en general, como por ejemplo polímeros.

**Modulo Teórico:**

- Introducción a la estructura de las biomoléculas.
- Interacciones intermoleculares y campos de fuerza clásicos.
- Como se derivan los parámetros?

- El concepto de “grano grueso” (GG). Bottom Up vs Top Down
- Métodos de derivación sistemática de parámetros GG
- Métodos empíricos de derivación parámetros GG
- El campo de fuerzas SIRAH (proteínas, ADN, Solvente, Iones, Lipidos, Glycanos)
- Implementación en paquetes de simulación (Amber y Gromacs).
- Simulaciones Multiescala
- Ejemplos de aplicación

**Modulo Práctico\*:**

- Introducción al uso de visualizadores moleculares (VMD)
- Introducción al uso de paquetes de simulación por dinámica molecular (Amber y/ o Gromacs)
- Como correr simulaciones con SIRAH
- Aplicaciones a sistemas ejemplo (proteinas)
- Análisis de los resultados y el paquete SIRAHTools
- Aplicaciones a sistemas propuestos por los alumnos

**Evaluación:**

Se hará sobre las simulaciones de sistemas propuestos por los alumnos que deberán presentar un informe.

56

\* Todo el software utilizado es de libre acceso. Se requiere un conocimiento mínimo de Linux.

#### Bibliografía:

- Coarse-Graining of Condensed Phase and Biomolecular Systems. Ed. G. Voth. 2009 Taylor&Francis.
- Understanding Molecular Simulation. D. Frenkel and B. Smit. 2nd Edition. Ac. Press 2002.
- Coarse-grained models for biomolecular systems. W. G. Noid. J. Chem. Phys. 139, 090901 (2013)
- The power of coarse graining in biomolecular simulations. Helgi I. Ingolfsson, Cesar A. Lopez, Jaakko J. Uusitalo, Djurre H. de Jong, Srinivasa M. Gopal, Xavier Periole and Siewert J. Marrink
- SIRAH: a structurally unbiased coarse-grained force field for proteins with aqueous solvation and long-range electrostatics. Darre L, Machado MR, Brandner AF, Ferreira S, Gonzalez HC, Pantano S. JCTC, 2015, 11:723.
- SIRAH Tools: mapping, backmapping and visualization of coarse- grained models. Machado MR and Pantano S. SIRAH Tools: mapping, backmapping and visualization of coarse- grained models. Bioinformatics, 2016, 32:1568.
- A Coarse Grained Model for Atomic-Detailed DNA Simulations with Explicit Electrostatics Dans PD, Zeida A, Machado MR, Pantano S. JCTC, 2010, 6:1711.