



*1824 Universidad de Buenos Aires*

## **Resolución Consejo Directivo**

**Número:**

**Referencia:** EX-2022-01961131- -UBA-DMESA#FCEN - Aprobada en sesión del 21 de marzo de 2022

---

VISTO

La nota presentada por la Dirección del Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física, mediante la cual eleva la información del curso de posgrado Físicoquímica de Sistemas Biológicos para el año 2022,

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 1º: Aprobar en nuevo curso de posgrado Físicoquímica de Sistemas Biológicos de 120 horas de duración, que será dictado por el Dr. Daniel Mrugida con la colaboración del Dr. Eresto Marceca.

ARTÍCULO 2º: Aprobar el programa del curso de posgrado Físicoquímica de Sistemas Biológicos para su dictado durante el primer cuatrimestre de 2022.

ARTÍCULO 3º : Aprobar un puntaje máximo de tres (3) 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 5º: Comuníquese a todos los Departamentos Docentes, a la Dirección de Estudiantes y Graduados, a la Biblioteca de la FCEyN y a la Secretaría de Posgrado con copia del programa incluida. Cumplido pase a guarda temporal.

Digitally signed by MINDLIN Bernardo Gabriel  
Date: 2022.03.23 16:10:53 ART  
Location: Ciudad Autónoma de Buenos Aires

Digitally signed by REBOREDA Juan Carlos  
Date: 2022.03.23 16:34:58 ART  
Location: Ciudad Autónoma de Buenos Aires

**Formulario para la presentación de Cursos de Posgrado/Doctorado – Res. CD2819/18 - ANEXO 1****Información académica**

Año de presentación (\*)

2022

1-a-

Departamento docente que inicia el trámite:
Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física
Nombre del curso:
Fisicoquímica de Sistemas Biológicos
Nombre, Cargo y Título del docente responsable:
Daniel H. Murgida; Profesor Asociado (DE); Doctor de la UBA área Cs. Químicas
En caso de dictarse en paralelo con una materia de grado, nombre de la misma:
Tópicos de Fisicoquímica en Sistemas Biológicos
Nombre y Título de los docentes que colaboran con el dictado del curso (*) (*):
Ernesto J. Marceca; Profesor Asociado; Doctor de la UBA área Cs. Químicas
Fecha propuesta para el primer dictado luego de la aprobación:
Primer cuatrimestre del 2022

**Duración:**

Duración total en horas	120
Duración en semanas	16

**Distribución carga horaria:**

Número de horas de clases teóricas	58
Número de horas de clases de problemas	58
Número de horas de trabajos de laboratorio	0
Número de horas de trabajo de campo	0
Número de horas de seminarios	4

**Forma de evaluación:**

2 exámenes parciales y 1 seminario. Aprobación con 55/100 puntos en las 3 instancias.  
Promoción con 70/100 puntos en las 3 instancias.

**Lugar propuesto para el dictado (departamento, laboratorio, campo, etc.):**

Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física

**Puntaje propuesto para la carrera de doctorado:**

5

**Número de alumnos:**

Mínimo: 5

Máximo: no tiene

**Audiencia a quien está dirigido el curso:**

Estudiantes de Doctorado de Cs. Químicas, Cs. Biológicas, Bioquímica y carreras afines

**Necesidades materiales del curso:**

Aula equipada con pizarrón y proyector

1-b-

**Programa analítico del curso con Bibliografía (puede adjuntarse en hojas separadas):**

**1. FUNDAMENTOS TERMODINÁMICOS**

Repaso de los principios de la Termodinámica. Fundamentos axiomáticos. Sistemas, variables, flujos y campos. Espontaneidad, condiciones de equilibrio. Ecuación de Gibbs. Sistemas multicomponente. Potenciales termodinámicos. Propiedades molares parciales, potencial químico. Sistemas ideales y reales. Equilibrio osmótico y partición. Propiedades termodinámicas asociadas a cambios conformacionales en biomacromoléculas (desnaturalización, plegamiento, etc.). Hidrofobicidad. Sistemas iónicos. Fuerza iónica. Teoría de Debye-Hückel. Potencial electroquímico. Condiciones de estabilidad de sistemas macroscópicos. Conexión con la visión estadística. Sistemas fuera del equilibrio. Producción de entropía. Generalización del principio de Le Chatelier. Hipótesis de equilibrio local. Régimen estacionario lineal.

**2. MEMBRANAS BIOLÓGICAS**

Estructura de membranas y descripción termodinámica: fuerzas de estiramiento, curvatura, deformación y compresión. Estructura, energética y función de vesículas. Dinámica de membranas. Potenciales de superficie, dipolar y transmembrana. Difusión de iones. Movilidad iónica. Equilibrio Donnan. Transporte a través de membranas. Transporte activo y pasivo. El transporte contra gradiente: implicación con fuentes acopladas de energía libre. Bomba de sodio y potasio. Bombas de protones. Hipótesis quimiostática. Transducción nerviosa. Potencial de acción. Polarización-depolarización.

**3. TERMODINÁMICA ESTADÍSTICA**

Método estadístico. Modos internos. Equipartición de la energía. Peso estadístico. Distribución de Probabilidad. Función de distribución de Boltzmann. Ensamblajes. Partículas independientes. Función de partición para modos internos. Función de partición clásica. Relación entre propiedades microscópicas y macroscópicas: espacio de las fases y propiedades termodinámicas. Función de Correlación. Métodos de simulación de Monte Carlo y Dinámica Molecular. Aplicaciones a propiedades de soluciones acuosas, hidratación de iones, interacción del agua con proteínas y DNA.

**4. EQUILIBRIO QUÍMICO**

Interacciones entre macromoléculas. Interacciones macromolécula-ligando. Equilibrio químico y afinidad química. Unión específica e inespecífica. Cooperatividad. Alostereismo. Diagramas de Hill y Scatchard. Modelos MWC y KNF. Tratamiento estadístico del equilibrio químico en sistemas biológicos.

**5. FUNDAMENTOS DE MECÁNICA CUÁNTICA**

Postulados de la mecánica cuántica. Ecuación de Schrödinger. Modelos sencillos con solución analítica: partícula libre, partícula en una caja, barrera de potencial, efecto túnel, oscilador armónico, rotor rígido. Degeneración. Conceptos de teoría de perturbaciones. Método variacional lineal.

**6. ESTRUCTURA MOLECULAR**

Descripción clásica de la estructura de macromoléculas: péptidos, proteínas y ácidos nucleicos. Estabilidad estructural. Interacciones moleculares (tipo y origen de las mismas). Tipos de fuerzas intermoleculares y modelos. Unión H. Mecánica molecular. Potenciales moleculares. Optimización de geometría mediante métodos clásicos. Superficies de energía libre. Dinámica de solvatación. Transiciones estructurales en biomacromoléculas. Métodos aproximados para la resolución de la ecuación de Schrödinger.

#### 7. ESPECTROSCOPIAS ELECTRÓNICAS Y VIBRACIONALES

Interacción radiación-materia. Fenómenos de absorción, emisión y dispersión. Orbitales moleculares y transiciones electrónicas. Principio de Franck-Condon. Regla de oro de Fermi. Reglas de selección. Diagramas de Jablonski. Fotofísica y fotoquímica. Vibraciones moleculares. Actividad óptica. Instrumentación y aplicaciones biológicas de absorción UV-vis, dicroísmo circular, FTIR, Raman, fluorescencia. Técnicas estacionarias y resueltas en el tiempo. Microscopías acopladas a espectroscopía.

#### 8. MOVIMIENTO MOLECULAR Y PROPIEDADES DE TRANSPORTE

Visión estadística de la dinámica biológica. Movimiento Browniano. Distancia cuadrática media. Coeficiente de difusión. Ecuaciones de Stokes y de Einstein. Fricción viscosa. Difusión: primera y segunda ley de Fick. Longitud de polímeros. Transiciones hélice-ovillo. Difusión a nivel subcelular.

#### 9. CINÉTICA QUÍMICA

Reacciones y catálisis enzimática. Movimiento molecular a lo largo de una coordenada de reacción. Coherencia dinámica. Efecto isotópico. Tuneleo y efectos cuánticos.

#### 10. TRANSFERENCIA ELECTRÓNICA Y DE ENERGÍA

Teoría de las reacciones de transferencia electrónica. Cálculos por métodos clásicos y cuánticos de la transferencia electrónica. Factores nuclear, electrónico y de frecuencia en reacciones de transferencia electrónica. Teoría de Marcus y modelos cuánticos. Dependencia de la distancia en las reacciones de transferencia electrónica. Transferencias electrónicas a largas distancias en proteínas y entre proteínas. Modelos de Dutton y Gray. Fotoseparación de cargas. Transferencia electrónica fotoinducida en vesículas, membranas, bicapas y en proteínas. Transferencia protónica. Técnicas experimentales. Radiólisis, fotólisis flash, recuento de fotones (photon counting), TR-Raman, step-scan FTIR. Métodos fotoacústicos y fototérmicos. Casos de estudio: fosforilación oxidativa y fotosíntesis.

#### 11. CROWDING

Efecto del crowding sobre el equilibrio químico y la dinámica de procesos en sistemas biológicos. Tratamiento estadístico en base a modelos de grillas.

#### Bibliografía Principal:

- Physical Chemistry. Principles and Applications in Biological Sciences. Tinoco, Sauer, Wang, Puglisi. 2002 - Prentice Hall (ISBN 0-13-017960-4)
- Principles of Physical Biochemistry. Van Holde, Curtis Johnson, Shing Ho. 2006 - Pearson Education (ISBN 0-13-201744-x).

#### Bibliografía Adicional Optativa:

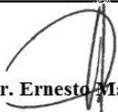
- Biophysical Chemistry. Allen. 2008 - Blackwell Publishing (ISBN 978-1-4051-2436-2).
- Fisicoquímica. Atkins, De Paula. 2002 - W.H. Freeman and Company (ISBN 0-7167-3539-3).
- Physical Biology of the Cell. Phillips, Kondev, Theriot. 2009-Garland Science (ISBN 978-0-8153-4163-5).
- Molecular Driving Forces. Statistical Thermodynamics in Chemistry and Biology. Dill, Bromberg. 2003 - Garland Science (ISBN 978-0-8153-2051-7)
- Methods in Modern Biophysics. Nölting. 2006 - Springer (ISBN 13-978-3-540-27703-3)

La materia está estructurada de modo de alternar unidades donde se desarrollan formalismos fisicoquímicos con el rigor matemático que permite la preparación previa de los alumnos, seguidas de unidades donde estos conceptos son aplicados en profundidad a casos de estudio de relevancia biológica. Cada unidad cuenta con una guía de entre 10 y 20 problemas que serán parcialmente resueltos en clase procurando la activa participación de los alumnos, y el resto se proponen para ejercitación domiciliaria.

Si bien la materia no tiene laboratorio, se incluye una clase mostrativa no obligatoria donde los alumnos interesados podrán visitar un laboratorio de investigación del DQIAQF y presenciar la realización de un experimento biofisicoquímico avanzado. Este consta de la caracterización microespectroelectroquímica Raman de una metaloproteína redox empleando instrumental de última generación. Esta demostración permite ejemplificar de manera integradora distintos conceptos adquiridos a lo largo de la materia.

(\*) Todos los cursos tendrán una validez de 5 años

(\*)(\*) Las actualizaciones de los docentes colaboradores son informados por la Dirección departamental al inicio de cada dictado del curso

Firma Subcomisión Doctorado
 Dr. Ernesto Marceca

Firma del docente responsable


E-mail y teléfono del docente responsable

Prof. Dr. Daniel H. Murgida E-mail: dhmurgida@qi.fcen.uba.ar Tel: 528-58208
---

**Solicitud de Financiación**

Año de presentación (\*)

\_\_\_\_\_

Departamento docente que inicia el tramite:

Nombre del curso:

Nombre y Título del docente responsable:

Costo propuesto del curso por alumno (\*):

Justificación del monto propuesto:

(\*) Las excepciones aplicables para cada alumno serán consistentes con la reglamentación del Consejo Directivo que regula los aranceles y excepciones (Res. CD 484/13). El docente responsable del curso solicitará las excepciones por nota al consejo directivo a través de Mesa de Entradas.