



Universidad de Buenos Aires
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales
Departamento de Química Biológica

- 3) Métodos de campos de fuerzas parametrizados. Campos de fuerzas para agua. Modelos de campo medio. Esquemas SPC, TIP3P, y TIP4P. Modelos polarizables. Esquemas de dipolo puntual y de carga fluctuante. Campos de fuerzas para biomoléculas. Potenciales AMBER y CHARMM. Construcción de un Campo de Fuerzas y Derivación de parámetros (Parámetros de unión y no-unión y determinación de cargas parciales mediante ajuste a potencial electrostático). Métodos de integración de las ecuaciones de Newton para la dinámica molecular. Modelos de solvente, explícitos, implícitos, modelos de agua (TIP3P, TIP4P, SPC, modelos de carga fluctuante). Condiciones periódicas de contorno (PBC) y sumas de Ewald.
- 4) Termodinámica estadística. Conceptos básicos. Aplicación a técnicas de simulación. Ensamblés. Función de partición y propiedades termodinámicas. Hipótesis ergódica. Esquema de simulación de Monte Carlo. Esquema de Dinámica Molecular. Detalles técnicos. Ejemplos de simulaciones de Monte Carlo y Dinámica Molecular. Determinación de propiedades estructurales y dinámicas. Termostatos (Berendsen, Nose). Dinámica de Langevin.
- 5) Cálculos de energía libre: Funciones termodinámicas Energía y Entropía. Métodos de muestreo sesgado (Umbrella Sampling). Métodos basados en transformaciones termodinámicas (integración termodinámica, teoría de perturbaciones FEP). Dinámica Molecular Guiada y aproximaciones de no equilibrio, relación entre trabajo y reversibilidad: ecuación (igualdad) de Jarzynski. Violaciones a la segunda ley. Muestreo de ligando implícito (ILS). Metadinámica.
- 6) Modelado de materiales I: conceptos
Estructura electrónica de sistemas extendidos: polímeros, sólidos y superficies. De los orbitales moleculares a las funciones de Bloch. Modelo de Tight-Binding. El espacio recíproco. Diagramas de bandas en dos y tres dimensiones y nivel de Fermi. Densidad de estados.
- 7) Modelado de materiales II: implementación y aplicaciones
Esquemas en condiciones periódicas basados en funciones de base deslocalizadas y pseudopotenciales. Cálculo de propiedades electrónicas y energéticas. Superficies: obtención de la estructura, reconstrucción, energía superficial, función trabajo, energías de adsorción.
- 8) Dinámica de Proteínas
Estabilidad de la Dinámica proteica y su caracterización. Cálculo de las desviaciones cuadráticas medias (RMSD). Cálculo de la Fluctuación media (RMSF). Clusterización, Modos normales y Modos Esenciales. Correlación de Movimientos. Coeficientes de involucramiento. Modelos de Alosterismo, cambio poblacional vs estereoquímico La hemoglobina como ejemplo de proteína alostérica. Modelos de alosterismo.
- 9) Métodos de predicción de complejos Macromoleculares
Interacción proteína ligando, métodos de predicción y cálculo de afinidades. Contribuciones a la energía libre de unión. Cálculo del término de energía, predicción del cambio en la entropía de unión, predicción del cambio en la energía libre de solvatación. Métodos de Poisson Boltzman y Generalizado de Born (mmpb(gb)sa). Métodos de predicción del complejo basados en algoritmos genéticos (Autodock). Métodos basados en transformadas de Fourier (FFT). Uso de grillas (FT-Dock). Funciones de Scoring (Métodos de partición electrostática, de contacto-vdw y solvatación, uso de



Universidad de Buenos Aires
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales
Departamento de Química Biológica

10) Modelos de multiescala y de Grano-Grueso.

Modelos Grano Grueso. Métodos Multiescala y multiréplicas. Combinación de Dinámica Molecular y muestreo por Monte Carlo. Muestreo en múltiples temperaturas. Muestreo en múltiples escalas de representación (all-atom y grano-grueso). Simulaciones de Réplica Exchange. Modelos de plegamiento, paradoja de Levinthal y estructuras decoy. Teoría del camino de plegamiento. Teoría del embudo o de los paisajes energéticos. Interacciones nativas y no nativas. Rugosidad del paisaje energético. Cinética y termodinámica de plegamiento. Medición y cálculo de factores-f. Teoría de la Frustración en las estructuras proteicas.

11) Métodos Híbridos Cuántico-Clásicos.

Modelado de fenómenos reactivos. Efectos del entorno. Modelos del continuo. Esquemas de Onsager y esquema PCM. Métodos híbridos cuántico-clásico (QM-MM). Esquemas aditivos. Acoplamiento cuántico-clásico. Componente electrostática: esquemas de carga fija y polarizables. Modelos sustractivos: método ONION e IMOMO. Ejemplos de aplicaciones QM-MM. Fenómenos de solvatación acuosa. Procesos enzimáticos. Cálculos de mecanismos de reacción, cálculo de barreras energéticas, búsqueda del camino de mínima energía, cálculo de barreras de energía libre. Coeficiente de transmisión. Contribuciones a la catálisis. Teoría del complejo activado, teoría de la trampa entrópica.

12) Modalidad de los Trabajos Prácticos: Los trabajos prácticos consistirán en el 50% del tiempo del curso. En los mismos el alumno aprenderá en una primera etapa a utilizar las herramientas básicas genéricas para la realización de a) simulaciones cuánticas o ab-initio (utilizando los programas Gaussian y SIESTA o Quantum Espresso) b) simulaciones Clásicas (Biomoléculas y clusters) utilizando el programa Amber. c) desarrollo y obtención de parámetros específicos para un sistema de interés. d) obtención de valores de energía libre para un proceso utilizando diferentes esquemas de muestreo.


Bibliografía:

- AR. Leach, Molecular Modelling 3rd de. 2006.
Bourne and Wessig, Structural Bioinformatics, Wiley-Liss 2003.
Lipkowitz et. al. Reviews in Computational Chemistry Wiley-VCH 2006.
Ira N Levine Quantum Chemistry (5th Edition) Prentice Hall 1999.
D Chanler, Introduction to Modern Statistical Mechanics Oxford University Press 2001


Dra. ADALÍ PECCI
DIRECTORA
Dpto. QUÍMICA BIOLÓGICA
C.E. y N. - U.B.A.

.....
V°B° Del Departamento


.....
Firma del Responsable


.....
V°B° de la Subcomisión de Doctorado



Universidad de Buenos Aires
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Referencia Expte. N° 497.995/2010

Buenos Aires, 06 AGO 2012

VISTO:

la nota (21/05/2012) de la Dra. Adali Pecci Directora del Departamento de Química Biológica, mediante la cual eleva, la información del curso de posgrado **SIMULACIÓN COMPUTACIONAL AVANZADA EN QUÍMICA, BIOQUÍMICA Y CIENCIA DE MATERIALES** que será dictado durante el Invierno de 2012 (23/07/2012 al 03/08/2012) por el Dr. Adrián Turjanski y el Dr. Marcelo Martí con la colaboración del Dr. Damian Scherlis y el Dr. Darío Estrin (DQIAyQF – FCEN)

CONSIDERANDO:

lo actuado por la Comisión de Doctorado de la FCEN el 10/07/2012,
lo actuado por la Comisión de Enseñanza, Programas, Planes de Estudio y Posgrado,
lo actuado por este cuerpo en Sesión Ordinaria realizada en el día de la fecha,
en uso de las atribuciones que le confiere el Artículo N° 113° del Estatuto Universitario,

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

Artículo 1°: Autorizar el dictado del curso de posgrado **SIMULACIÓN COMPUTACIONAL AVANZADA EN QUÍMICA, BIOQUÍMICA Y CIENCIA DE MATERIALES** de 80 hs. de duración.

Artículo 2°: Aprobar el programa de curso del curso de posgrado **SIMULACIÓN COMPUTACIONAL AVANZADA EN QUÍMICA, BIOQUÍMICA Y CIENCIA DE MATERIALES** obrante a fs 25 a 27 del expediente de la referencia.

Artículo 3°: Ratificar un puntaje máximo de tres (3) puntos para la Carrera del Doctorado.

Artículo 4°: Aprobar un arancel de 20 Módulos. Disponer que los fondos recaudados por el dictado del curso deberán ser utilizados según lo dispuesto en la Resolución 072/2003.

Artículo 5°: Comuníquese a la Dirección del Departamento de Química Biológica, a la Biblioteca de la FCEN y a la Subsecretaría de Postgrado (con fotocopia del programa fs 25 a 27). Cumplido Archívese.

Resolución CD N° 1602 - -
SP/med 16/07/2012

Dr. JAVIER LÓPEZ DE CASENAVE
SECRETARIO ACADEMICO

Dr. JORGE ALIAGA
DECANO