



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

DEPARTAMENTO DE QUÍMICA BIOLÓGICA

CURSO DE POSTGRADO O SEMINARIO

AÑO: 2013

1) NOMBRE DEL CURSO/SEMINARIO:

SIMULACIÓN COMPUTACIONAL AVANZADA EN QUÍMICA, BIOQUÍMICA Y CIENCIAS DE MATERIALES.

2) NOMBRE Y APELLIDO DEL RESPONSABLE:

MARCELO MARTÍ.

3) DOCENTES QUE COLABORAN EN EL DICTADO DEL CURSO:

DARÍO ESTRÍN, DAMIÁN SCHERLIS, ADRIÁN TURJANSKI, MARCELO MARTÍ, EZEQUIEL DE LA LLAVE, ALEJANDRO NADRA, ARIEL ZEIDA, JUAN PABLO ARCÓN.

4) FECHA DE INICIACIÓN: 22/07/2013 FECHA DE FINALIZACIÓN: 02/08/2013

5) CANTIDAD DE HORAS TOTALES DE DICTADO:

- a) TEORICAS: 40.
- b) SEMINARIOS: -
- c) LABORATORIO: -
- d) CLASES TEORICAS-PRACTICAS: 40.

6) FORMA DE EVALUACIÓN:

INFORMES ESCRITOS DE TRABAJOS PRÁCTICOS + EXAMEN FINAL ESCRITO.

7) LUGAR DE DICTADO:

AULA DEPARTAMENTO DE QUÍMICA INORGÁNICA, ANALÍTICA Y QUÍMICA FÍSICA + LABORATORIO DEL DEPARTAMENTO DE COMPUTACIÓN.

8) PUNTAJE QUE OTORGA PARA EL DOCTORADO: 3.



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

9) Nº DE ALUMNOS: Mínimo: 10

Máximo: 40

10) ARANCEL PROPUESTO: -

11) PROGRAMA ANALÍTICO Y BIBLIOGRAFÍA DEL CURSO:

1) Concepto de simulación computacional en Ciencia: relación entre experimento, teoría y simulación. Simulación computacional en Química. Modelos existentes para la determinación de la superficie de energía potencial. Planteo de estrategias de simulación para responder interrogantes de interés químico.

2) Métodos ab-initio. Ecuaciones de Hartree-Fock. Funciones de base. Determinación de propiedades moleculares. Métodos semiempíricos. Idea general e implementaciones CNDO, MNDO, INDO. Modelos semiempíricos basados en parametrización: Métodos AM1 y PM3. Teoría del funcional de la densidad. Teoremas fundamentales. Implementación de Kohn y Sham. Rango de aplicabilidad, ventajas y desventajas de las distintas técnicas de estructura electrónica.

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.



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

6) Cálculo de Sistemas Extendidos-Simulación de Materiales Estructura electrónica de sistemas extendidos: polímeros, sólidos y superficies. Funciones de Bloch. Diagramas de bandas y nivel de Fermi. Densidad de estados. Implementación metodológica: funciones de base deslocalizadas y pseudopotenciales. Cálculo de la energía superficial, reconstrucciones, función trabajo, energía de adsorción.

7) 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 Alostereismo, cambio poblacional vs estereoquímico La hemoglobina como ejemplo de proteína alostérica. Modelos de alosterismo.

8) 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 energías atómicas de contacto (ACE)). Interacción proteína-proteína. Métodos de predicción de complejos proteína-proteína, homo y heterodímeros, formación de multímeros. Métodos de clusterización (Clus-pro). Métodos de complementaridad de superficie (Patch-Dock). Caracterización de los complejos. Interacción proteína-proteína en complejos de transferencia electrónica.


9) 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.

Bibliografía:

Leach A. R., *Molecular Modelling: Principles and Applications*. 2nd ed. 2001. Pearson Ed.
Cramer C.J., *Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models*. 2006. Wiley.



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


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

.....
VºBº Del Departamento


M.A. MUÑOZ
.....
Firma del Responsable


.....
VºBº de la Subcomisión de Doctorado

ella Uzzuez



Universidad de Buenos Aires
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Referencia Expte. N° 497.995/2010

Buenos Aires, 26 AGO 2013

VISTO:

la nota de fecha 30/05/2013 y la nota del 12/07/2013 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 CIENCIAS DE MATERIALES** que será dictado durante el Invierno de 2013 (22/07/13 al 02/08/13) y que tiene como responsable al Dr. Marcelo Martí y como docentes el Dr. Dario Estrin, el Dr. Damian Scherlis, el Dr. Adrián Turjanski, el Dr. Marcelo Martí, el Dr. Ezequiel de la Llave, el Dr. Alejandro Nadra, el Dr. Ariel Zeida, y el Dr. Juan Pablo Arcón

CONSIDERANDO:

lo actuado por la Comisión de Doctorado de la FCEN el 06/08/2013,
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 1º: Dar validez al dictado del curso de posgrado **SIMULACIÓN COMPUTACIONAL AVANZADA EN QUÍMICA, BIOQUÍMICA Y CIENCIAS DE MATERIALES** de 80 hs. de duración.

Artículo 2º: Aprobar el Programa del curso de posgrado **SIMULACIÓN COMPUTACIONAL AVANZADA EN QUÍMICA, BIOQUÍMICA Y CIENCIAS DE MATERIALES** obrante a fs 42 a 44

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

Artículo 4º: 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 5º: 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 42 a 44 incluida). Cumplido Archívese.

-- 1977

Resolución CD N°
SP/med 14/08/2013

Dr. MARÍA ISABEL GASSMANN
SECRETARÍA ACADÉMICA- ADJUNTA

Dr. JORGE ALIAGA
DECANO