





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

10) ARANCEL PROPUESTO: 0 o el mínimo que disponga la FCEN

11) PROGRAMA ANALÍTICO Y BIBLIOGRAFÍA DEL CURSO:

PROGRAMA ANALITICO - Química Biológica II-B

Interacciones moleculares y Termodinámica

Uniones covalentes. Modelos mecano-cuánticos. Interacciones atómicas (non-covalent, non-bonded): electrostáticas, puentes salinos, uniones hidrógeno, fuerzas de Van der Waals, fuerzas de London. Dipolos: permanentes, transitorios. Efectos del solvente. Interacciones hidrofóbicas. Agua. Rol en los sistemas biológicos. Campos de fuerzas empíricos: mecánica molecular. Potenciales de campo medio y potenciales polarizables. Campos de fuerzas para agua y para biomoléculas. Concepto de superficie de energía potencial. Relación entre propiedades microscópicas y macroscópicas: espacio de las fases y propiedades termodinámicas. Energía libre. Constante de equilibrio. Energía de activación. Velocidad de reacción. Control termodinámico y cinético.

Modelado Molecular de biomoléculas

Métodos de simulación de Monte Carlo y Dinámica Molecular. Análisis de resultados de simulación y estimación de errores. El problema del mínimo global. Métodos de minimización. Recocido simulado. Resolución de primeros principios de estructuras de proteínas utilizando simulaciones de dinámica molecular. Plegamiento de proteínas. Modelado comparativo. Alineamiento de secuencias. Utilización de bases de datos y homologías. Estimación de energías libres. Potencial de fuerza media. Efectos del solvente. Simulación de la unión de proteínas a ligandos. Docking. Bases de datos tridimensionales. Bioinformática. Captura de los datos originados en las mediciones bioquímicas. Protein Data Bank. Sitios útiles en Internet. Archivos. Tratamiento de los datos. Recuperación de la información.

Métodos para la determinación de estructuras de biomoléculas

Difracción de rayos X. Refinación de estructuras. Determinación de estructuras en solución. Resonancia magnética nuclear. Fundamentos. Resonancia magnética nuclear bidimensional. Efecto nuclear Overhauser. Microscopía electrónica a bajas temperaturas. Dicroísmo circular. Fluorescencia. Espectroscopía de Masas aplicada a biomoléculas. MALDI.

Estructura de Proteínas

Estructura de Proteínas y Conformación. Amino ácidos: Características funcionales de las cadenas laterales. Unión peptídica (amida, imida). Estructura primaria. Degradación de Edman. Grupos funcionales: derivatización de las proteínas. Estructura secundaria:  $\alpha$ -hélices,  $3_{10}$ -hélices, plegamiento  $\beta$ . Estructura terciaria. Plegamiento proteico. Interacciones intramoleculares: puentes hidrógeno, electrostática, hidrofóbica. Caminos del plegamiento proteico. Diagramas de Ramachandran. Clasificación de las estructuras proteicas. Cambios conformacionales. Inducción por ligandos. Chaperonas. Estructura cuaternaria. superficie de contacto. Propiedades espectroscópicas de proteínas. Aplicaciones. Proteínas globulares. Proteínas fibrosas. Evolución Molecular. Agregación de proteínas y patogénesis. Ingeniería y biotecnología de proteínas.





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

## PROGRAMA TRABAJOS PRACTICOS

**Perfil de los Trabajos Prácticos:** 2 veces por semana (4 hrs/día trabajo). Ocho semanas.

Fluorescencia: fundamentos, solventes, ciclodextrinas, proteínas. Interacción proteína/ligando

Dicroísmo circular: fundamentos, calibración,

Cristalografía: lisozima, difracción de rayos X.

Biosensor: interacciones proteína-proteína

Interacciones moleculares

Modelado de biomoléculas

## **BIBLIOGRAFIA**

- Physical Chemistry: Principles and Applications in Biological Sciences, 4<sup>th</sup> edition. I. Tinoco, et al , Prentice Hall, 2002.
- Molecular Modeling, A.R. Leach, Longman, 1996.
- Computational Chemistry, G. H. Grant, W. Graham Richards, Oxford Chemistry Primers, Oxford University Press, 1996.
- Computer Simulation of Liquids, M. P. Allen and D. J. Tildesley, Oxford University Press, 1987.
- Protein Structure Prediction - A Practical Approach, M. J. E. Sternberg editor, Oxford University Press, 1996.
- Introduction to Protein Structure, C. Branden and J. Tooze Garland Publishing, Inc. New York and London, 1999.
- Crystallization of Biological Macromolecules. Edited by Alexander McPherson. CSHL Press, New York 1999 (USA).
- Proteins. Structures and molecular properties. Edited by Thomas Creighton. W. H. Freeman and Company, New York, 1996.
- Protein Folding Handbook, Edited by J. Buchner and T. Kiefhaber. Wiley-VCH, 2005
- Structure and mechanism in protein science. A. Fersht, W. H. Freeman and Company, New York, 1999.
- Principles of Fluorescence Spectroscopy. Joseph R. Lakowicz. 3<sup>ra</sup> edición. Ed. Springer, 2006

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

VºBº Del Departamento

  
Juan Carlos Casaró

Firma del Responsable

  
Roberto López  
Elba Vazquez

VºBº de la Subcomisión de Doctorado



Universidad de Buenos Aires  
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Referencia Expte. N° 502.625/2013

Buenos Aires, 26 AGO 2013

**VISTO:**

la nota presentada por la Dra. Adali Pecci, Directora del Departamento de Química Biológica, mediante la cual eleva la información y el programa del curso de posgrado **Química biológica IIB/estructura y función de biomoléculas**, que será dictado durante el **segundo cuatrimestre de 2013** (desde el 14/08/2013 al 29/11/2013), por el Dr. Julio Javier Caramelo y colaboradores,

**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 la Comisión de Presupuesto y Administración  
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:** Autorizar el dictado del curso de posgrado **Química biológica IIB/estructura y función de biomoléculas**, de 192 hs. de duración.

**Artículo 2º:** Aprobar el programa del curso de posgrado **Química biológica IIB/estructura y función de biomoléculas** obrante a fs 3 y 4 del expediente de la referencia.

**Artículo 3º:** Aprobar un puntaje máximo de CINCO (5) puntos para la Carrera del Doctorado.

**Artículo 4º:** Aprobar un Arancel de 20 Módulos. Disponer que los montos recaudados serán utilizados conforme a lo dispuesto por la Resolución CD N° 072/03.

**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 incluida fs 3 y 4). Cumplido, archívese.

Resolución CD N°  
SP/Inec/25/08/2013

2012 4

Dra. MARÍA ISABEL GASSMANN  
SECRETARIA ACADEMICA ADJUNTA

Dr. JORGE ALIAGA  
DECANO