

Anexo:

Curso de posgrado: Simulación computacional avanzada en Química, Bioquímica y Ciencias de Materiales.

Puntaje propuesto: 3 (tres)

Duración: Dos semanas

Horas de Clase:

10 clases teóricas de 4 hs

10 clases de Trabajos Prácticos de 4hs

Carga horaria Total: 80 hs.

Asignaturas Correlativas: Licenciatura en Cs Biológicas, Físicas, Químicas o equivalente.

Forma de Evaluación: 1 examen final teórico, 1 examen parcial práctico

Programa Analítico:

- 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.
- 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 Alostерismo, 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 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 complementariedad de superficie (Patch-Dock). Caracterización de los complejos. Interacción proteína-proteína en complejos de transferencia electrónica.

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.

En una segunda etapa el alumno utilizará las técnicas aprendidas anteriormente aplicadas a un problema de interés propio con la ayuda de los docentes.



Universidad de Buenos Aires
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Referencia Expte. N° 497.995/2010

Buenos Aires, 29 MAR 2010

- VISTO:

la nota presentada por los Dres. Juan Carlos Calvo, la Dra. Elba Vazquez y la Dra. Viviana Castilla, mediante la cual eleva la Información y el Programa del Curso de posgrado **SIMULACION COMPUTACIONAL AVANZADA EN QUIMICA, BIOQUIMICA Y CIENCIA DE MATERIALES**, que dicta en el primer cuatrimestre de 2010 (marzo – abril 2010), por el Departamento de QUIMICA INORGANICA, ANALITICA Y QUIMICA FISICA y el Departamento de QUIMICA BIOLOGICA y que será dictado por el Dr. Darío Estrin, Damian Scherlis, Adrián Turjanski y Marcelo Martí

CONSIDERANDO:

- lo actuado por la Comisión de Doctorado el 22/02/2010,
- 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 **SIMULACION COMPUTACIONAL AVANZADA EN QUIMICA, BIOQUIMICA Y CIENCIA DE MATERIALES** de 80 hs. de duración.


Artículo 2°: Aprobar el Programa Analítico del Curso de Posgrado **SIMULACION COMPUTACIONAL AVANZADA EN QUIMICA, BIOQUIMICA Y CIENCIA DE MATERIALES**, obrante a fs 5 y 6 del Expediente de la Referencia.

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

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

Artículo 5°: Comuníquese a la Dirección del Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física, a la Biblioteca de la FCEyN y a la Subsecretaría de Postgrado (con fotocopia del programa (fs 5 y 6) incluida), Comuníquese a la Dirección de Alumnos (sin fotocopia del Programa). Cumplido, archívese.

Resolución CD N° 0443==
SP/med/22/02/2010


Dra. MATILDE RUSTICUCCI
SECRETARIA ACADÉMICA ADJUNTA


Dr. JORGE ALIAGA
DECANO