



QIU 2015  
2

**FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES**  
**UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES**

---

Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física

**CARRERA:** Posgrado / Doctorado

**CUATRIMESTRE:** Invierno

**AÑO:** 2015

**CODIGO DE CARRERA:** 51

**ASIGNATURA:** Simulación computacional avanzada en Química, Bioquímica y Ciencias de Materiales.

**CODIGO:** 6354

**PUNTAJE:** 3 (tres)

**DURACIÓN:** 20 de Julio al 31 de Julio de 2015

**HORAS DE CLASE SEMANAL:**

- Teóricas: 20 hs.
- Prácticas/Laboratorio: 20 hs.

**TOTAL:** 40 hs.

**CARGA HORARIA TOTAL:** 80 hs.

**ASIGNATURAS CORRELATIVAS:** Licenciatura en Cs. Biológicas, Físicas, Químicas o equivalente.

**FORMA DE EVALUACIÓN:** examen final domiciliario, y exposición de un seminario.

**Objetivos del curso:** proveer a alumnos de Doctorado en las áreas de Física, Química, Biología, y disciplinas afines de los conceptos teóricos y herramientas necesarias para utilizar los métodos de Simulación Computacional en el desarrollo de sus temas de investigación.

**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.

**Dra. SARA ALDABE BILMES**  
DIRECTORA  
DEPTO. QUIMICA INORGANICA  
ANALITICA y QUIMICA FISICA



FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES  
UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física

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. Ensamblados. 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) Cálculo de Sistemas Extendidos

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 Alosterismo, cambio poblacional vs estereoquímico. La hemoglobina como ejemplo de proteína alostérica. Modelos de alosterismo. Plegamiento de proteínas y modelos de multiescala.

8) Fenómenos reactivos en solución y proteínas.

Modelado de fenómenos reactivos. Efectos del entorno. Modelos del continuo. Esquemas de Onsager y esquema PCM. Métodos híbridos cuántico-clásicos (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.

SCA - 2/3

Dra. SARA ALDABE BILMES  
DIRECTORA  
DEPTO. QUIMICA INORGANICA  
ANALITICA y QUIMICA FISICA



FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES  
UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

---

Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física

**Bibliografía:**

- Molecular Modeling, Principles and Applications, 2<sup>nd</sup> edition A.R. Leach. Prentice Hall, 2001.
- Quantum Chemistry, I.N. Levine. Prentice Hall, 2000.
- Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods, R. Martin, Cambridge University Press, 2004.
- Atomic and Electronic Structure of Solids, E. Kaxiras, Cambridge University Press, 2004.

**Profesores:**

Estrín, Darío  
Scherlis, Damián  
Turjanski, Adrián  
Martí, Marcelo

Dra. SARA ALDABE BILMES  
DIRECTORA  
DEPTO. QUIMICA INORGANICA  
ANALITICA y QUIMICA FISICA



Universidad de Buenos Aires  
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Referencia Expte. N° 505.076/2015

Buenos Aires,

3 JUL 2015

**VISTO:**

la nota de la Dra. Sara Aldabe Bilmes, Directora del Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física, mediante la cual eleva la información del curso de posgrado **Simulación computacional avanzada en química, bioquímica y ciencias de materiales**, que será dictado del 20 al 31 de julio 2015 por los Dres. Damián Scherlis Perel, Marcelo Martí, Adrian Turjansky y Darío Estrín, con la colaboración de los Dres. Mónica Pickholz, Leandro Martínez y Sergio Pantano,

**CONSIDERANDO:**

- lo actuado por la Comisión de Doctorado,
- lo actuado por la Comisión de Postgrado,
- 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 1°:** Autorizar el dictado del curso de posgrado **Simulación computacional avanzada en química, bioquímica y ciencias de materiales**, de 80 horas de duración.

**Artículo 2°:** Aprobar el programa del curso de posgrado **Simulación computacional avanzada en química, bioquímica y ciencias de materiales** obrante a fs 3 a 5 del expediente de la referencia.

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

**Artículo 4°:** Comuníquese a la Dirección de Alumnos y a la Secretaría de Postgrado.

**Artículo 5°:** Comuníquese a la Dirección del Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física y a la Biblioteca de la FCEyN con fotocopia de los programas incluida, fs 3y 4 del expediente de la referencia. Cumplido archívese.

Resolución CD N°  
SP/iga 06/07/2015

1709

Dr. PABLO J. PAZOS  
Secretario Adjunto de Posgrado  
FCEyN - UBA

Dr. JUAN CARLOS REBORDA  
DECANO