



CD-0469-16 8.11.2016 5

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES  
UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física

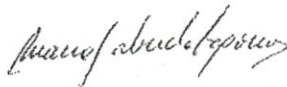
Ciudad Autónoma de Buenos Aires, diciembre de 2015

Señor Secretario/a Académico/a  
de la Facultad de Ciencias  
Exactas y Naturales  
S/D

Tengo el agrado de dirigirme al señor Secretario Académico a efectos de comunicarle el desarrollo del curso de post-grado y/o doctorado que se dictará en este Departamento durante el ..... invierno de 2016.

- 1- Denominación del Curso: **Escuela de Modelado de Biomoléculas**
- 1a- Carácter del Curso: ampliar conocimientos  
(para Doctorado: ampliar conocimientos, actualización, extensión profesional)
- 2- Fecha de iniciación: 20/06/15
- 3- A dictarse en: **Depto. de Qca. Inorgánica, Analítica y Qca. Física**
- 4- Responsable (s): Dr. Darío Estrin, Dr. Damián Scherlis, Dr. Marcelo Martí y Dr. Adrián Turjanski.  
(si no revistan en la Facultad, adjuntar nota solicitando la autorización pertinente, la que comprenderá el dictado del Curso y la firma de las Actas de Examen pertinentes).  
(Además agregar curriculum vitae resumido, debidamente firmado por el Director de Departamento o por el interesado).
- 5- Cantidad de horas semanales: 80hs totales
- 5a- Nro. de horas semanales de clases teóricas: 40hs totales
- 5b- Nro. de horas semanales de clases de problemas: ---
- 5c- Nro. de horas semanales de trabajos prácticos: 40hs totales
- 6- Condiciones de ingreso: Poseer título de grado de las carreras de química, bioquímica o biología.
- 7- Nro. de alumnos (mínimo y máximo): 5-20
- 8- Forma de evaluación: La nota final se obtiene mediante un examen final domiciliario, un seminario de artículo de investigación en la última clase, y el desempeño en los trabajos prácticos.
- 8a- Certificado de aprobación: SI-NO-(tachar lo que no corresponda)
- 9- Puntaje propuesto de acuerdo con el carácter del curso: 3 (tres)
- 10- Nro. de código: nuevo
- 11- Se acompaña despacho de la Sub-Comisión Departamental con Vº. Bº. del Director de Departamento.
- 12- Se propone un arancel de ...2500.....módulos, teniendo en cuenta como base el valor de \$ .....(el que rija en ese momento).

SUBCOMISIÓN DE DOCTORADO

  
Dra. M. GABRIELA LAGORIO  
SECRETARIA ACADEMICA  
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

DEPARTAMENTOS: Dep. de Química Inorgánica, Analítica y Química Física en conjunto con el Dep. de Química Biológica.

CARRERA: Posgrado / Doctorado

CUATRIMESTRE: INVIERNO

AÑO: 2016

CODIGO DE CARRERA: 51

MATERIA: Escuela de modelado de biomoléculas

CODIGO: nuevo

PUNTAJE: 3

DURACIÓN: 2 semanas

HORAS DE CLASE SEMANAL:

- Teóricas: 20hs
- Trabajos Prácticos: 20hs

TOTAL: 40hs.

CARGA HORARIA TOTAL: 80hs.

CONDICIONES DE INGRESO: Poseer título de grado de las carreras de química, bioquímica o biología.

FORMA DE EVALUACIÓN: La nota final se obtiene mediante un examen final domiciliario, un seminario de artículo de investigación en la última clase, y el desempeño en los trabajos prácticos.

PROGRAMA ANALÍTICO:

**Objetivos:** Proveer a alumnos de Doctorado en las áreas de Bioquímica, Química y Biología, de los conceptos teóricos y herramientas necesarias para utilizar los métodos de Simulación Computacional en el desarrollo de sus temas de investigación relacionados. El curso está orientado tanto a estudiantes que trabajen en estas áreas, como a estudiantes que emplean herramientas experimentales, pero que deben familiarizarse con la bioinformática estructural como herramienta accesoria.

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

EMB-1/4

Dra. M. GABRIELA LAGORIO  
SECRETARIA ACADEMICA  
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

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. Modelos de solvente, explícitos, implícitos, modelos de agua (TIP3P, TIP4P, SPC, modelos 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).

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. Métodos de integración de las ecuaciones de Newton para la dinámica molecular. 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) Métodos de multi escala. 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 entre subsistemas. Esquemas sustractivos (Oniom).

### 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 Alosteroismo, 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

EMB-2/4

Dra. M. GABRIELA LAGORIO  
SECRETARIA ACADEMICA  
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

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.

9) Modelos de multiescala y de Grano-Grueso. Modelos de Grano-Grueso y multiescala. Introducción a las simulaciones de Grano-Grueso (GG). Derivación de modelos y parámetros siguiendo estrategias bottom-up y top-down. Modelos GG para membranas, proteínas, ADN, polisacáridos y solvente acuoso para dinámica molecular. Métodos Multiescala para solutos atómicos con solvente GG o soluto atómico/GG. Ejemplos de campos de fuerza GG. El campo de fuerza SIRAH y ejemplos de aplicación. Limitaciones de las aproximaciones GG.

10) Simulaciones de membrana: Bicapas lipídicas como modelo de membranas biológicas. Transiciones de fase de bicapas lipídicas. Estudio de propiedades físicas de bicapas mediante simulaciones de dinámica molecular clásica: correlación con experimentos. Bicapas asimétricas. Formación de poros. Aplicaciones bio-médicas: interacción de fármacos con membranas y sistemas de *Drug delivery*. Otros métodos para el estudio de membranas mediante simulaciones.

### Bibliografía:

- 1) Understanding molecular simulation; from algorithms to applications, Dan Frenkel, Berend Smit, AP, 2001.
- 2) Molecular Modeling, principles and applications, A. Leach, Pearson, 2001.
- 3) The art of molecular dynamics simulation, D. Rapaport, 2nd edition, Cambridge Press, 2004.
- 4) Quantum Chemistry, 7th edition, I.N. Levine, 2013.
- 5) Computer simulation of biomolecular systems, W.F. van Gunsteren, P.K. Weiner, Springer, 1997.
- 6) Computer simulation of protein structures and interactions, S. Fraga, J.M. Robert Parker, and J.M. Pockock, Springer, 2013.

### 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 programa Gaussian, SIESTA, y Lio) b) Simulaciones Clásicas (Biomoléculas y clusters) utilizando el programa Amber. c) Desarrollo y la obtención de parámetros específicos para un sistema de interés. d) la predicción de propiedades estructurales y reactividad mediante cálculos de energía libre utilizando diferentes esquemas de muestreo.

EMB-3/4

Dra. M. GABRIELA LAGORIO  
SECRETARIA ACADEMICA  
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

**Cronograma de los Trabajos Prácticos:**

TP1	20/06	Estructura electrónica de sistemas pequeños.
Lunes		
TP2	21/06	Dinámica molecular clásica – Básico.
Martes		
TP3	22/06	Dinámica molecular clásica – Avanzado.
Miércoles		
TP4	23/06	Simulaciones de Monte Carlo - Packmol
Jueves		
TP5	24/06	Parametrización de potenciales atomísticos.
Viernes		
		Dinámica molecular coarse grain (SIRAH)
TP6		Determinación de energía libre (integración termodinámica, dinámica guiada).
TP7		Métodos híbridos QM-MM -
TP8		TP especial
		TP especial

Dr. Darío Estrín  
Dr. Damián Scherlis  
Dr. Marcelo Martí  
Dr. Adrián Turjanski

EMB-4/4

*Maria Gabriela Lagorio*  
Dra. M. GABRIELA LAGORIO  
SECRETARIA ACADEMICA  
DEPTO. QUIMICA INORGANICA  
ANALITICA y QUIMICA FISICA



Universidad de Buenos Aires  
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Referencia Expte. N° 505.713/16

Buenos Aires, 14 MAR 2016

**VISTO:**

la nota presentada por el Dr. Darío Estrín, Director Adjunto del Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física, mediante la cual eleva la información y el programa del curso de posgrado **Escuela de modelado de biomoléculas**, que será dictado del 4 al 15 de julio de 2016 por el Dr. Damián Scherlis Perel, el Dr. Darío Estrín, el Dr. Marcelo Martí y el Dr. Adrián Turjanski con la colaboración de la Dra. Luciana Capece,

**CONSIDERANDO:**

- lo actuado por la Comisión de Doctorado
- lo actuado por la Comisión de 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 1°: Aprobar el curso de posgrado de **Escuela de modelado de biomoléculas** de 80 hs. de duración.

Artículo 2°: Aprobar el programa del curso de posgrado **Escuela de modelado de biomoléculas** obrante a fs 3 a 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 2500 módulos eximiendo del mismo a los estudiantes de Doctorado de universidades públicas. Disponer que los montos recaudados sean utilizados según lo dispuesto a la Resolución 072/03.

Artículo 5°: Comuníquese a la Biblioteca de la FCEyN con fotocopia de los programas incluida.

Artículo 6°: Comuníquese a la Dirección del Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física a la Dirección de Movimiento de Fondos, a la Dirección de Presupuesto y contabilidad, a la Dirección de Alumnos y a la Secretaría de Postgrado. Cumplido archívese.

Resolución CD N° 0469  
SP ga 24/02/2016

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

Dr. JUAN CARLOS REBOREDA  
DECANO