



FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES
UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física

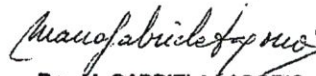
Ciudad Autónoma de Buenos Aires, noviembre de 2015

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: **Fundamentos de Simulación Molecular en Química**
- 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: 40hs totales
- 5a- Nro. de horas semanales de clases teóricas: 20hs totales
- 5b- Nro. de horas semanales de clases de problemas: —
- 5c- Nro. de horas semanales de trabajos prácticos: 20hs 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, 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: 1,5 (uno y medio)
- 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 ...1250.....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: Fundamentos de Simulación Molecular en Química

CODIGO: nuevo

PUNTAJE: 1,5

DURACIÓN: 1 semana

HORAS DE CLASE SEMANAL:

- Teóricas: 20hs
- Trabajos Prácticos: 20hs

TOTAL: 40hs.

CARGA HORARIA TOTAL: 40hs.

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, 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 las técnicas de simulación computacional 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.

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. FSCQ-1/2

Dra. M. GABRIELA LAGORIO
SECRETARIA ACADÉMICA
DEPTO. QUÍMICA INORGÁNICA
ANALÍTICA Y QUÍMICA FÍSICA



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. 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. Ensamblajes. 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).

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) Handbook of computational chemistry, J. Leszczynski Editor, Springer, 2012.
- 5) Quantum Chemistry, 7th edition, I.N. Levine, 2013.

Modalidad de los Trabajos Prácticos:

Los trabajos prácticos consistirán en el 50% del tiempo del curso. (20 horas) 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, Quantum Espresso, 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.

Cronograma de los Trabajos Prácticos:

Lunes	20/06	Estructura electrónica de sistemas pequeños.
Martes	21/06	Dinámica molecular clásica – Básico.
Miércoles	22/06	Dinámica molecular clásica – Avanzado.
Jueves	23/06	Simulaciones de Monte Carlo - Packmol
Viernes	24/06	Parametrización de potenciales atomísticos.

Dr. Darío Estrín

Dr. Damián Scherlis

Dr. Marcelo Martí

Dr. Adrián Turjanski

FSCQ-2/2

Marcos Fabuelo Lopez
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° 505.681/15

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 **Fundamentos de simulación molecular en química**, que será dictado del 4 al 8 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 **Fundamentos de simulación molecular en química** de 40 hs. de duración.

Artículo 2°: Aprobar el programa del curso de posgrado **Fundamentos de simulación molecular en química** obrante a fs 3 y 4 del expediente de la referencia.

Artículo 3°: Aprobar un puntaje de uno y medio (1,5) puntos para la Carrera de Doctorado.

Artículo 4°: Aprobar un arancel de 1250 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°

0468

SP ga 24/02/2016

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

Dr. JUAN CARLOS REBOREDA
DECANO