



## Principios de Físicoquímica Molecular aplicados a sistemas biológicos.

Carácter del curso	Optativo/Electivo
Semestre en que se dicta	Semestre par
Número de créditos	6
Carga horaria semanal (hs)	Clases teóricas: 2 Horas (14 semanas) Clases laboratorio: 2 Horas (10 semanas)
Previaturas	Físicoquímica Molecular Básica o Modelado Molecular (al menos 1 de ellas)
Cupo	

### **Estructura Responsable:**

Departamento de Experimentación y Teoría de la Estructura de la Materia y sus Aplicaciones (DETEMA), Grupo de Química y Biología Computacional (CCBG)

### **Docente Responsable:**

Mauricio Vega Teijido

### **Docentes Referentes:**

Aline Katz

Oscar N. Ventura

### **Objetivos:**

- Presentar al estudiante una visión molecular de los sistemas químicos en un proceso de complejidad estructural creciente.
- Fomentar la comprensión de los conceptos fisicoquímicos subyacentes en las transformaciones químicas y la diversidad estructural en sistemas biológicos y relacionados.
- Crear conocimiento técnico básico en metodologías computacionales y su uso cooperativo para el estudio de los factores químicos y electrónicos que controlan los procesos biológicos (reactividad).

### **Contenido:**

Programa y cronograma previsto	
<b>Teóricos</b>	
Semana 1	Introducción General a la Físicoquímica Molecular
Semana 2	Introducción histórica de la Mecánica Cuántica (QM)
Semana 3	Bases físicas y matemáticas de la Mecánica Cuántica
Semana 4	Conjuntos de base, HF y configuración electrónica
Semana 5	Post-HF, DFT, métodos semiempíricos. Propiedades moleculares y de la densidad electrónica.
Semana 6	Complementariedad entre Mecánica Molecular (MM) y QM. Métodos simultáneos y secuenciales.
Semana 7	Complejos Moleculares. Métodos experimentales de determinación de estructura de molecular. CD, NMR, Difracción de Rayos X y Criomicroscopía Electrónica (Cryo-EM)

<b>Fecha</b>	<b>MA-SGC-2-3.59</b>	<b>V.01</b>
<b>Res. 70 CFQ 22/06/2023</b>	Página 1 de 3	



## Principios de Físicoquímica Molecular aplicados a sistemas biológicos.

Semana 8	Generación de coordenadas para estudios QM. Solvatación implícita y explícita.
Semana 9	Métodos de Optimización de los sistemas moleculares (EM, DM). Modelado de moléculas biológicas y otros blancos de unión molecular.
Semana 10	Métodos de construcción y estudio de complejos moleculares
Semana 11	Métodos híbridos (QM/MM, QM/QM2)
Semana 12	Seminarios de ejemplos de casos bibliográficos
Semana 13	Seminarios de ejemplos de casos bibliográficos
Semana 14	Consideraciones integradoras finales y consultas sobre casos.

### **Clases Prácticas en laboratorio. Comienza en la segunda semana:**

Semana 2	Geometría espacial, construcción y manipulación de moléculas (moléculas pequeñas, horquillas beta, superposición de péptidos, etc.)
Semana 3	Introducción a Gaussian09, Vi, Nano y Unix. Construcción y optimización de Ácido acetilsalicílico y otros compuestos (discusión de algunas propiedades)
Semana 4 - 5	Modelado de moléculas pequeñas de relevancia biológica Ej: bases nitrogenadas de ácidos nucleicos (importancia de tautomería, enlaces de hidrógeno y vinculación con rol biológico).
Semana 6	Estudio computacional de compuestos y construcción de bases de datos.
Semana 7	Preparación de sitio receptor de unión (protonación, MM, análisis del sitio activo, obtención de coordenadas para QM)
Semana 8 - 9	Construcción de complejos moleculares. Docking de ligandos en sitios putativos de unión (obtención de coordenadas del ligando y el entorno del receptor y solvente)
Semana 10 -11	Relajación mediante MM y optimización de modelos por DM (combinación DM/QM)
Semana 12	-
Semana 13	-
Semana 14	-

### **Bibliografía:**

- Material multimedia preparado por docentes del Laboratorio.
- Manuales del software usado en los laboratorios.
- N.H. Morgon, K. Coutinho, Métodos de Química Teórica e Modelagem Molecular, Livraria da Física; 1ª edição, 2007.
- J. Andrés, J. Beltrán, Química Teórica y Computacional, Univesitat Jaume-I, 2000.
- C.E. Dykstra, Physical Chemistry, A Modern Introduction, Prentice-Hall, New Jersey, 1997.
- D.A. McQuarrie, J.D. Simon, Physical Chemistry, A Molecular Approach, University Science Books, Sausalito, California, 1998.
- G.C. Schatz, M. A. Ratner, Quantum Mechanics in Chemistry, Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey, 1993.

<b>Fecha</b>	<b>MA-SGC-2-3.59</b>	<b>V.01</b>
<b>Res. 70 CFQ 22/06/2023</b>	Página 2 de 3	



## Principios de Fisicoquímica Molecular aplicados a sistemas biológicos.

### Modalidad del Curso:

	Teórico	Práctico	Laboratorio	Otros (*)
Asistencia Obligatoria			N/A	N/A
Modalidad Flexible (carga horaria mínima)			N/A	N/A

La asistencia no es obligatoria, en ninguna de las 2 modalidades.

(\*) Especificar (talleres, seminarios, visitas, tareas de campo, pasantías supervisadas, etc.)

### Régimen de ganancia:

El curso tendrá 2 pruebas escritas (20+30=50 puntos del total). También se valorará la actuación individual, en los informes prácticos y en seminarios (20 puntos del total). Para exonerar el curso de debe alcanzar como mínimo 36 puntos en 70; se aprueba el curso si se obtiene un puntaje comprendido entre 21 y 35, y se obtiene la categoría a examen si el puntaje obtenido es menor a 21.

**Por mayor información visitar la página del curso o consultar directamente en la estructura responsable de la asignatura.**

Fecha	MA-SGC-2-3.59	V.01
Res. 70 CFQ 22/06/2023	Página 3 de 3	