

QUILMES, 18 MAR 2008

VISTO el Expediente N° 827-0174/08, y

**CONSIDERANDO:**

Que por el citado Expediente la Secretaría de Posgrado tramita la aprobación del Curso de Doctorado denominado "Simulación de dinámica de proteínas".

Que a través de la Resolución (CS) N° 283/05, se aprueba el Reglamento de Cursos y Seminarios de Posgrado de la Universidad.

Que el mencionado curso constituye un aporte relevante a la formación de posgrado en las especialidades involucradas.

Que los antecedentes académicos y profesionales de los docentes a cargo del dictado del mismo, garantizan calidad y solvencia en el desarrollo de los contenidos especificados.

Que la evaluación del citado curso ha cumplido con los requisitos estipulados en el Art. 6° del Reglamento de Cursos y Seminarios de Posgrado de esta Casa de Altos Estudios.

Que la presente se dicta en virtud de las atribuciones conferidas al Rector por el Art. 72° del Estatuto Universitario.

Por ello,

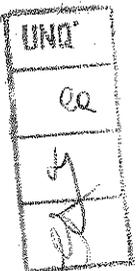
**EL RECTOR DE LA UNIVERSIDAD NACIONAL DE QUILMES**

**RESUELVE:**

ARTICULO 1°: Aprobar el dictado del curso de Doctorado denominado "Simulación de dinámica de proteínas", cuyo programa y características generales se detallan en el Anexo de la presente Resolución.

ARTICULO 2°: Designar como docentes expositores para el dictado del curso al Dr. Sebastián Fernández Alberti y la Dra. Juliana Palma.

ARTICULO 3°: Disponer que el curso tendrá una duración total de 30 horas y que se podrá dictar hasta el ciclo lectivo 2010.



00189

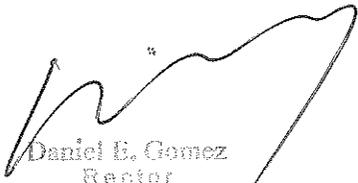
ARTICULO 4º: Establecer un cupo máximo de 15 alumnos. En el caso que los postulantes excedan esa cifra, el docente a cargo realizará la selección correspondiente.

ARTICULO 5º: Regístrese, practíquense las comunicaciones de estilo y archívese.

RESOLUCION (R) N°: 00189



Dr. Germán Dabat  
Secretario Académico  
UNIVERSIDAD NACIONAL DE QUILMES

  
Daniel E. Gomez  
Rector  
UNIVERSIDAD NACIONAL DE QUILMES



**Anexo**

Título del Curso de Doctorado: "Simulación de dinámica de proteínas".

Lugar de Realización: Universidad Nacional de Quilmes - Roque Sáenz Peña 352, Bernal.

Docentes Expositores: Dr. Sebastián Fernández Alberti y Dra. Juliana Palma.

Carga horaria: 30 horas.

Fecha de realización: año 2008 con aprobación hasta el 2010.

Destinatarios: graduados en Biotecnología, Química, Bioquímica, Farmacia, Ingeniería en Alimentos.

Objetivos:

Objetivo general

Conocer y comprender los fundamentos y los alcances de los métodos computacionales utilizados para estudiar la dinámica de proteínas.

Objetivos específicos

- 
- Conocer las metodologías más difundidas de simulación de proteínas: Dinámica Molecular, Monte Carlo, Modos Normales, Métodos Híbridos clásico/cuánticos.
  - Distinguir los diferentes modelos computacionales de representación de proteínas y apreciar sus alcances y limitaciones para el estudio de procesos que ocurren en diferentes escalas de tiempo y espacio.
  - Aprender a analizar los resultados de una simulación de manera consistente con el modelo planteado.



Contenidos:

1 **-Fundamentos de Mecánica Molecular (S. Fernández Alberti):** Modelos estructurales para el estudio teórico de proteínas. Descripción y comparación de los campos de fuerza más utilizados. Estrategias de parametrización. Modelado del solvente. Algoritmos de optimización de geometría a partir de la estructura obtenida por cristalografía de rayos X o NMR.

2 **-Fundamentos de Dinámica Molecular y Monte Carlo (J. Palma):** Preparación del sistema: condiciones de contorno y equilibración. Tratamiento de las interacciones de largo alcance. Aplicación de restricciones. Análisis de propiedades termodinámicas sencillas. Análisis de propiedades dependientes del tiempo. Evaluación de convergencia y consistencia. Método de Monte Carlo. Dinámica molecular Vs. Monte Carlo.

3 **Modos Normales (S. Fernández Alberti):** Fundamento. Limitaciones y alcances para el análisis de los movimientos de una proteína. Diferentes niveles de cálculo aplicados a distintos tamaños de sistemas: péptidos, proteínas, ribosomas y virus.

4 **Estabilidad de los estados de una proteína (J. Palma):** Cambios de energía libre y espontaneidad de los cambios que puede tener a una proteína. Dificultades asociadas al cálculo de la energía libre. Métodos de perturbación de energía libre e integración termodinámica. Determinaciones de acidez de los residuos del interior de una proteína; estabilidad de complejos proteína-proteína y ligando-proteína; influencia de mutaciones puntuales sobre la estabilidad de la proteína plegada. Metadinámica.

5 **Dinámica y función (S. Fernández Alberti):** mecanismos moleculares relacionados con la función biológica. Obtención de información sobre la función biológica a partir de los modos normales más lentos. Análisis de cambios conformacionales. Identificación de huecos y canales internos. Transferencia intramolecular de señales alostéricas. Identificación de dominios. Medidas de flexibilidad. Efecto de mutaciones.



**6-Dinámica y catálisis enzimática (J. Palma):** Problemas asociados al estudio de procesos reactivos. Descripción de los enlaces químicos que se rompen y se forman. Métodos de estimación de constantes de velocidad de procesos enzimáticos. Cambios conformacionales y catálisis enzimática. Discusión de los modelos existentes para explicar la capacidad catalítica de los enzimas.

### **Bibliografía**

- 1) "*Protein simulations*", Advances in Protein Chemistry Vol. 66, Edited by F.M Richards, D.S. Eisenberg, J. Kuriyan and Valerie Daggett, Elsevier Ac. Press, California, 2003.
- 2) "*Dynamics of proteins and nucleic acids*", S. Hervey and J.A. McCammon, Cambridge University Press, Cambridge, 1987.
- 3) "*Molecular modeling. Principles and applications*", A.R. Leach, Prentice Hall, Harlow, England, 2001.
- 4) "*Computational Biochemistry and Biophysics*", Edited by O Becker, A.D MacKerell, B. Roux and M. Watanabe, Marcel Dekker, New York, 2001.

Metodología: Teórico-práctico

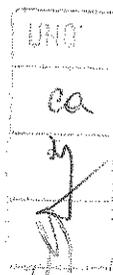
Modalidad: Presencial

Requisitos de asistencia: Asistencia al 80 % del total de las clases.

Evaluación: Trabajo Final.

Certificación: Certificados de Asistencia y Aprobación de la Universidad Nacional de Quilmes.

Cupo máximo: 10 alumnos.



Arancel:

Arancel general de \$ 240.-

Los egresados de la Universidad están exentos del pago.

Presupuesto:

La realización del curso quedará sujeta a que la recaudación de fondos garantice la cobertura de su presupuesto.

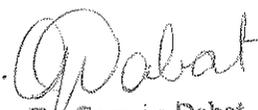


Requerimientos:

Los currículos de los docentes constan de fs. 7 a 21 del Expediente N° 827-0174/08.

ANEXO RESOLUCIÓN (R) N°:

00189

  
Dr. Germán Dabat  
Secretario Académico  
UNIVERSIDAD NACIONAL DE QUILMES

  
Daniel E. Gomez  
Rector  
UNIVERSIDAD NACIONAL DE QUILMES