



Departamento de Física
Universidad Nacional del Sur
Curso Internacional de posgrado

***Fisicoquímica de sistemas biológicos:
Modelización de la estructura, dinámica, estabilidad y reacciones químicas***

7 al 18 de Noviembre de 2016

Profesores: Philippe Dumas (Université de Strasbourg, Francia), Diego Guérin (Universidad del País Vasco-EHU, España); Sergio Pantano (Instituto Pasteur Montevideo, Uruguay), María Marta Branda (UNS), Marcelo Costabel (UNS), Juan Viso (UNS), Fernando Zamarreño (UNS).

Descripción:

El curso está orientado a alumnos avanzados, graduados, y posgraduados de Física, Química, Bioquímica, Biología, Ingeniería Química y carreras afines. El objetivo es presentar a los alumnos las herramientas y las técnicas que existen en la actualidad para comprender y simular los procesos bioquímicos a nivel atómico. Para ello se presentarán los conceptos iniciales sobre la composición y estructura de las macromoléculas biológicas: proteínas, lípidos, ácidos nucleicos y polisacáridos. Se explicarán los métodos que permiten conocer las estructuras de proteínas a nivel atómico (resonancia magnética nuclear bidimensional, cristalografía de rayos X y criomicroscopía electrónica); se darán los principios de Dinámica Molecular y Química Cuántica aplicados a estos sistemas; y se presentarán fundamentos de la regulación biológica y la estabilidad de macromoléculas. El curso comprende un total de 60 horas, con clases teórico-prácticas y un examen final.

Temario de clases:

<p>Parte 1: (D.Guérin, M. Costabel) Principios Biológicos de la vida. Macromoléculas biológicas. Proteínas: composición química y estructura. Determinación de estructuras atómicas Relación estructura-función Modelización de estructuras atómicas. Programas de visualización (Rasmol, VMD)</p>	<p>Parte 3: (María Marta Branda) Modelización Cuántica en Bioquímica Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) Teoremas de Hohenberg-Kohn. Kohn y Sham. Potenciales de Intercambio y Correlación. Aproximaciones: LDA, GGA y métodos híbridos. Modelos periódicos y de racimos. Híbridos QM/MM. Método ONIOM</p>
<p>Parte 2: (S.Pantano, J.Viso, F. Zamarreño) Modelización Dinámica Introducción a las Bases de Datos. Mecánica Molecular. Campos de fuerza. Técnicas de Simulación. Estructura de un programa de DM. Análisis y exploración de las trayectorias Coarse-Grain. Análisis de resultados.</p>	<p>Parte 4: (Philippe Dumas) Termodinámica vs Cinética: Regulación Biológica. Termodinámica del equilibrio Regulación Cinética en el no equilibrio. Estabilidad de macromoléculas. Transiciones de Fases Más allá del equilibrio termodinámico.</p>

Información Importante:

Lugar: Departamento de Física – UNS. Av. Alem 1253, Bahía Blanca,
Se dispone de 4 ayudas para alojamiento para alumnos de otras localidades

Organizadores y contactos:

Dra. M. Marta Branda (UNS); cabranda@criba.edu.ar
Dr. Marcelo Costabel (UNS); marcelo.costabel@gmail.com; Tel: +54 291 4595101 ext: 2805
Dr. Diego M.A. Guérin (UPV/EHU)

Auspiciantes: UNS (CSU-266/16); Ayuda de movilidad DG de la UPV/EHU; Acción CYTED 216RT0506