

## Formulario de Curso

### Asignatura:

Principios de Fisicoquímica Molecular aplicada a sistemas biológicos - PFMASB  
(curso de PEDECIBA/Química Plan 2022)

---

**Instituto o Unidad:** Facultad de Química

**Departamento o Área:** DETEMA, PEDECIBA Química

### Profesor Responsable de la asignatura:

Dr. Mauricio Vega Tejjido, Grupo de Química y Biología Computacional - CCBG

### Otros docentes:

Dra. Aline Katz, Grupo de Química y Biología Computacional – CCBG

Lic. Anabela Martínez, Grupo de Química y Biología Computacional – CCBG

### Docentes invitados<sup>1</sup>:

<sup>1</sup> Agregar CV si el docente participa por primera vez.

---

### Dictado

El curso se dicta de forma anual en su versión de grado (avanzado) y de forma bienal en su versión de posgrado. Se dicta en los semestres pares.

### Carga horaria

- Horas clase (práctico): 3hs/sem
- Horas clase (laboratorio): 2hs/sem
- Horas consulta: por foros de moodle de Facultad de Química
- Horas evaluación: 2 parciales de 2hs, informes de prácticos y mini-proyecto en posgrado

#### ◦ Subtotal horas docencia directa:

- 5hs/sem

#### ◦ Subtotal de horas de trabajo domiciliario:

- Horas estudio: 3hs/sem
- Horas proyecto final/monografía: 10hs

**Horas Totales:** lo correspondiente a 14 semanas.

### Nº de Créditos:

Versión de grado: 6 créditos

Versión de posgrado: 7 créditos

**Público objetivo:**

El curso ha sido desarrollado para estudiantes avanzados de grado, de Maestría o Doctorado de las áreas Química, Biología, Bioinformática, etc.

**Cupos:**

No se ha fijado un cupo, pero ha sido pensado estimando un máximo flexible de 10 estudiantes por edición.

---

**Objetivos:**

La Físicoquímica Molecular es un área altamente interdisciplinaria situada entre la Química, la Física y la Bioquímica, la cual apunta a examinar los procesos moleculares químicos y biológicos. Busca estudiar y entender cómo se logra eficiencia y selectividad en las reacciones químicas en sistemas biológicos y su interacción con el medio solvente. La función de las biomoléculas está íntimamente ligada a su estructura supramolecular global y en particular a su estructura electrónica local, la conjunción de estos aspectos es fundamental para una interpretación más completa de los fenómenos en estudio. Este curso se enfoca en mostrar cómo los conceptos y las técnicas de varios campos de la química, particularmente la química computacional y el modelado molecular, se pueden complementar en la búsqueda de la interpretación de las transformaciones que tienen lugar en sistemas biológicos y relacionados. El curso explora las fronteras entre la química y la biología computacional identificando los conceptos fisicoquímicos moleculares fundamentales que gobiernan las transformaciones y la variación estructural de los sistemas biológicos y su entorno reactivo.

**Objetivos específicos:**

Fomentar la comprensión de los conceptos fisicoquímicos subyacentes en las transformaciones químicas y la diversidad estructural en sistemas biológicos y relacionados.

Crear conocimiento técnico en metodologías computacionales y su uso cooperativo para el estudio de los factores químicos y electrónicos que controlan los procesos biológicos (reactividad).

---

**Conocimientos previos recomendados:**

El curso ha sido desarrollado para estudiantes avanzados de grado, de Maestría o Doctorado, del área Química, Biología, Bioinformática, etc. Se ofrece en 2 versiones, una para grado que es anual (6 créditos) y otra versión para posgrado que se ofrece de forma bianual. La versión de posgrado incluye un mini-proyecto final (7 créditos).

---

**Metodología de enseñanza:**

Presencial para los trabajos prácticos, los teóricos pueden ser presenciales o híbridos, según las necesidades de las/los inscriptos del año.

**Asistencia:**

No tiene asistencia presencial obligatoria, pero se realiza un seguimiento en el cumplimiento de las actividades propuestas.

**Forma de evaluación:**

El curso se aprobará con dos pruebas escritas (40% del total), con la participación individual en los seminarios y laboratorios (20%) y con informes en el estilo de artículos científicos (40% del total), se suma al ítem anterior lo relativo al mini-proyecto final de investigación para posgrado (debido a los 7 créditos).

---

## Temario:

Programa y cronograma previsto

### Teóricos

Semana 1	Introducción General a la Fisicoquímica Molecular
Semana 2	Introducción a la Mecánica Cuántica (QM)
Semana 3	Conjuntos de base, HF y configuración electrónica
Semana 4	Post-HF, DFT, métodos semiempíricos y propiedades moleculares
Semana 5	Complementaridad entre Mecánica Molecular (MM) y QM. Métodos simultáneos y secuenciales.
Semana 6	Complejos Moleculares. Métodos experimentales de determinación de estructura de molecular. CD, NMR, Difracción de Rayos X y Criomicroscopía Electrónica (Cryo-EM)
Semana 7	Generación de coordenadas para estudios QM. Solvatación implícita y explícita.
Semana 8	Métodos de Optimización de los sistemas moleculares (EM, DM). Modelado de moléculas biológicas y otros blancos de unión molecular.
Semana 9	Métodos híbridos (QM/MM, QM/QM2)
Semana 10	Seminarios individuales
Semana 11	Seminarios individuales
Semana 12	Seminarios individuales
Semana 13	Consultas
Semana 14	<u>Semana de la Prueba escrita</u>

### Prácticos:

Semana 1	Geometría espacial, construcción y manipulación de moléculas (moléculas pequeñas, horquillas beta, superposición de péptidos, etc.)
Semana 2	Introducción a Gaussian09, Vi, Nano y Unix. Construcción y optimización de Ácido acetilsalicílico (discusión de algunas propiedades)
Semana 3	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 4	Estudio computacional de compuestos y construcción de bases de datos.
Semana 5	Preparación de sitio receptor de unión (protonación, MM, análisis del sitio activo, obtención de coordenadas para QM)
Semana 6	Docking de ligandos en sitios putativos de unión (obtención de coordenadas del ligando y el entorno del receptor y solvente)
Semana 7	Relajación mediante MM y optimización de modelos por DM (combinación DM/QM)
Semana 8	Miniproyectos de investigación
Semana 9	Miniproyectos de investigación
Semana 10	Miniproyectos de investigación
Semana 11	Miniproyectos de investigación
Semana 12	Miniproyectos de investigación
Semana 13	Consultas e informes
Semana 14	<u>Semana de la Prueba escrita</u>

---

## **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.

## **Otros datos del curso:**

### **Fecha de inicio y finalización:**

Lunes 11 de agosto a miércoles 12 de noviembre de 2025

### **Institución, Salón y Horario:**

Se realiza en el laboratorio del CCBG (Computational Chemistry and Biology Group), DETEMA, Facultad de Química. Teóricos: Lunes de 15:30 a 17:30. (Mauricio Vega) Prácticos Miércoles de 15:30 a 17:30 (Aline Katz).

---