DOCTORADO

Programa Analítico de Materia:

1. Nombre de la materia:

Química Computacional orientada al estudio de Dinámica Molecular de sistemas complejos

2. Presentación de la materia:

La aproximación molecular es muy difícil de alcanzar desde un punto de vista experimental. Son pocas las metodologías capaces de escalar hasta ese nivel de resolución, y aún así, presentan limitaciones importantes cuando se trata de capturar la evolución temporal de un sistema con detalle atomístico.
Frente a esto, la química computacional permite modelar y analizar procesos moleculares en condiciones controladas, manipulando variables que resultan inaccesibles en el laboratorio, y accediendo a información estructural y dinámica de enorme valor.
Esta materia propone una aproximación a la dinámica molecular orientada al estudio de sistemas complejos, con foco en la comprensión y simulación de fenómenos que involucra múltiples interacciones simultáneas —inter- e intramoleculares— y posibles efectos colectivos o cooperativos. A lo largo de la cursada, se abordarán distintas estrategias computacionales en función del tipo de sistema y fenómeno a estudiar, con una integración progresiva entre fundamentos teóricos, diseño de simulaciones y análisis de resultados.
El objetivo es brindar a los estudiantes herramientas conceptuales y técnicas para explorar problemas reales de relevancia en bioquímica, ciencia de materiales, nanotecnología y otras áreas, consolidando una mirada crítica y actualizada sobre el potencial de la química computacional como puente entre teoría y experimento.

3. Docente responsable:

Nombre y Apellido: Martini María Florencia.
Máximo título alcanzado: PhD.

4. Equipo Docente:

-

5. Requisitos de admisibilidad a la materia:

Manejo básico de sistema operativo Linux por terminal (deseado).
Orientada a doctorandos de Ingeniería Química, Bioingeniería, Química, Física, Bioquímica y carreras afines.

6. Duración en horas:

Horas teóricas: 30
Horas prácticas: 30
Horas totales: 60

7. Idioma del dictado:

Castellano.

8. ¿Podría dictarse una versión en idioma inglés?

Sí.

9. Objetivos de aprendizaje:

1. Lograr que el alumno maneje la tridimensionalidad de las estructuras estudiadas.
2. Brindar herramientas computacionales para la resolución de diferentes problemáticas del estudio de sistemas moleculares complejos.
3. Acercar al alumno al análisis de los resultados obtenidos con las diferentes herramientas utilizadas.

10. Contenidos:

- Armado y Optimización de Estructuras Químicas.
- Obtención manual y sistematizada de descriptores bi y tridimensionales.
- Trabajo sobre bases de datos y bibliotecas de compuestos.
- Manipulación tridimensional de macromoléculas.
- Dinámica Molecular de sistemas complejos.
- Análisis de parámetros estructurales y fisico-químicos de los sistemas estudiados.

11. Trabajo de laboratorio:

Los Trabajos Prácticos serán de índole computacional.

12. Metodología de enseñanza:

La estructura de la materia se organizará de la siguiente manera:

- 25 horas de contenidos teórico-conceptuales, dictados por la docente responsable de la asignatura.
- 25 horas de trabajos prácticos grupales, con acompañamiento y asistencia de la docente, orientados a la aplicación de los conceptos desarrollados en clase.

- 5 horas destinadas al desarrollo asistido de proyectos, donde los grupos contarán con espacios específicos para avanzar en la planificación y ejecución de su propuesta.
- 5 horas dedicadas a la exposición de los proyectos finales, que serán elaborados a lo largo de la cursada y constituirán parte de la evaluación integral de la materia.

13. Bibliografía obligatoria:

- Leach, A. R. (2001). Molecular modelling: Principles and applications (2a ed.). Pearson Education.

14. Bibliografía complementaria:

- Jensen, F. (2017). Introduction to computational chemistry (3a ed.). Wiley.
- GROMACS development team. (2025). GROMACS User Manual (Versión 2025.2). https://doi.org/10.5281/zenodo.15387070

15. Recursos didácticos para la enseñanza:

Clases de la materia en formato pdf en campus virtual de la materia.
Guía de Trabajos Prácticos de la materia.

16. Modalidad de evaluación:

Las instancias de evaluación se dividirán en dos: 1) un informe de la parte práctica desarrollada en la materia y 2) una exposición final sobre un algoritmo de resolución a un problema planteado previamente en clase. Este algoritmo lo irán trabajando durante el desarrollo de toda la cursada.
La guía para la elaboración y posibles sistemas de estudio a abordar serán brindados por la docente a cargo. En los mismos deberán incluir técnicas de Química Computacional, adecuadamente fundamentadas. Se evaluará, en una primera instancia, el proceso de elaboración del algoritmo de resolución, y en segundo lugar, los alumnos realizarán una presentación y defensa del proyecto propuesto, en las dos últimas clases de la asignatura.

17. Requisitos de aprobación:

La materia se evaluará con una escala numérica del 1 al 10, siendo aprobado con una nota de 5 o mayor.
El promedio de las notas del informe y la presentación resultarán en la nota final de la materia.