

---

## Curso: Escuela de Simulación Computacional de Biomoléculas. Cronograma Tentativo

### Lunes 30 de Julio de 2018 – día 1:

9:00 a 10:30 hs. Teórica 1. Dr. Darío Estrin - Introducción a los métodos de simulación computacional en Química.

10:30 a 12:00 hs. Teórica 2. Dr. Darío Estrin- Métodos de estructura electrónica. Parte 1. Método de Hartree Fock. Cálculo de propiedades moleculares.

12:00 a 13:00 hs. Almuerzo

13:00hs a 18:00 hs. Tiempo libre para realización trámites CELFI

### Martes 31 de Julio 2018 – día 2.

9:00 a 12:30 hs. Teórica 3 . Dr. Damián Scherlis.

Métodos de estructura electrónica Parte 2. Métodos semiempíricos, post Hartree Fock y teoría del funcional de la densidad.

12:30 a 14:00 hs. Almuerzo

14:00hs a 18:00 hs. Práctica 1 . Dra. Luciana Capece- Ari Zeida. Cálculos de estructura electrónica y parametrización.

### Miércoles 1 de Agosto de 2018– día 3.

9:00 a 11:30 hs. Teórica 4 Dr. Darío Estrin. Campos de fuerzas clásicos.

11:30 a 13:00 hs. Teórica 5. Dr. Mariano González Lebrero. Arquitecturas de cómputo.

13:00 a 14:00 hs. Almuerzo y posters

14:00hs a 18:00 hs. Teórica 6. Leandro Martínez. Termodinámica Estadística. Dinámica Molecular.

### Jueves 2 de Agosto. Día 4.

9:00 a 12:30 hs. Teórica 7. Dr. Leandro Martínez. Técnicas de determinación de energías libres.

12:30 a 14:00 hs. Almuerzo

14:00hs a 18:00 hs. Práctica 2 Dr. Leandro Martínez, Ari Zeida. Dinámica molecular clásica.

### Viernes 3 Agosto de 2018 – día 5.



9:00 a 11:00 hs. Teórica 8 – Dr. Darío Estrin. Métodos multi escala QM-MM.

11:00 a 13:00 Teórica 9. Dr. Damián Scherlis. Estructura electrónica de sistemas extendidos.

13:00 a 14:00 hs. Almuerzo

14:00hs a 18:00 hs. Práctica 3. Dr. Ari Zeida. Dinámica molecular clásica de proteínas.

### **Lunes 6 de Agosto de 2018 – día 6**

9:00 a 10:30 hs. Teórica 10 –Dra. Luciana Capece. Dinámica de proteínas.

11:00 a 12:30hs. Teórica 11-Gerhard Hummer. Teoría de métodos de muestreo avanzado aplicado a biomoléculas.

12:30 a 14:00 hs. Almuerzo

14:00hs a 18:00 hs. Práctica 4 – QM-MM y muestreo avanzado. Dr. Ari Zeida. Dr. Gerhard Hummer.

### **Martes 7 de Agosto de 2018 – día 7**

9:00 a 10:30 hs. Teórica 12 – Dr. Adrián Turjanski. Métodos de predicción de complejos droga-proteína y proteína-proteína.

11:00 a 12:30hs. Teórica 13-Dr. Gerhard Hummer. Aplicaciones de Métodos de muestreo avanzado.

12:30 a 14:00 hs. Almuerzo

14:00hs a 18:00 hs. Práctica 5 – Dr. Ari Zeida Métodos de docking.

### **Miércoles 8 de Agosto de 2018 –día 8**

9:00 a 12:30 hs. Teórica 14 – Dra. Mónica Pickholz. Simulación de membranas.

12:30 a 14:00 hs Almuerzo

14:00hs a 18:00 hs. Práctica 6 – Dra. Mónica Pickholz y Ari Zeida. Simulación de membranas.

### **Jueves 9 de Agosto de 2018 –día 9**

9:00 a 12:30 hs. Teórica 15 – Dr. Pablo Dans. Métodos de grano grueso. Aplicación a proteínas y ácidos nucleicos.

12:30 a 14:00 hs Almuerzo

14:00hs a 18:00 hs. Práctica 7 – Dr. Ari Zeida, Dr. Pablo Dans. Métodos de grano grueso.

### **Viernes 10 de Agosto de 2018 – día 10.**



---

9:00 a 12:30 hs. Puesta en común y cierre.

12:30 a 14:00 hs Almuerzo

14:00hs a 18:00 hs. Presentación de trabajo integrador por parte de los alumnos.