



## **Curso de Posgrado Introducción a la Biofísica Computacional**

*Departamento de Física de la Universidad Nacional del Sur (Bahía Blanca)  
12 al 22 de noviembre de 2018.*

### **Objetivos:**

Ofrecer una introducción a la Biofísica Computacional de Macromoléculas, empleando técnicas de simulación por dinámica molecular y conceptos avanzados de docking virtual. Al final del curso el alumno debería ser capaz de: 1) comprender un artículo científico donde se utilicen técnicas computacionales; 2) realizar (*in silico*) mutaciones de macromoléculas que puedan afectar su estructura y función específica; 3) Preparar, correr e interpretar una simulación por dinámica molecular; 4) diseñar y desarrollar un experimento de docking virtual.

### **Programa Resumido:**

#### **Parte A – Modelado Molecular**

- Elementos básicos de Modelado Molecular. (Chimera)
- Modelado Electroestático (APBS)
- Minimización de Energía basada en Campos de Fuerza.
- Dinámica Molecular (GROMACS – NAMD – Coarse Grain)

#### **Part B – Docking Proteína-Ligando**

- Algoritmos
- ‘Structure based drug design’
- Autodock y SwissDock

### **Docentes responsables:**

*-Dr. Alejandro Giorgetti*

*Profesor Asociado Dept. Biotechnology, University of Verona, Italy*

*-Dr. Marcelo Costabel*

*Profesor Asociado Dept. Física – Universidad Nacional del Sur- Argentina -*

**Información:** [marcelo.costabel@gmail.com](mailto:marcelo.costabel@gmail.com)