

	UNIVERSIDAD DISTRITAL FRANCISCO JOSÉ DE CALDAS	
	FACULTAD DE CIENCIAS Y EDUCACIÓN	
	PROYECTO CURRICULAR DE LICENCIATURA EN FÍSICA	
	SYLLABUS	
	NOMBRE DEL ESPACIO ACADEMICO: SIMULACIONES COMPUTACIONALES DE BIOSISTEMAS	
CÓDIGO: XX	PERIODO ACADEMICO: 2011-1	NUMERO DE CREDITOS: 3
TIPO DE ESPACIO ACADEMICO: OBLIGATORIO BASICO (NO) OBLIGATORIO COMPLEMENTARIO (NO) ELECTIVO INTRINSECO (SI) ELECTIVO EXTRINSECO (NO)		NUMERO DE HORAS: TRABAJO DIRECTO <u> 3 </u> TRABAJO MEDIADO <u> 1 </u> TRABAJO AUTONOMO <u> 5 </u>
JUSTIFICACIÓN: Colombia ocupa un lugar de privilegio a nivel mundial en biodiversidad, nos urge conocerla para poderla preservar, este tipo de tareas se han desarrollado tradicionalmente en senos de disciplinas tales como: bioquímica, biología y botánica entre otras, y en la actualidad áreas de las denominadas “sombriilla” como la biología y genética computacional y la biofísica, a las cuales convergen las anteriores, están liderando estas tareas. Uno de los campos de la biofísica que actualmente tiene una gran actividad es la biofísica molecular computacional, en la cual se estudia desde el punto de vista de la física, interacciones fundamentales de gran relevancia a nivel molecular en la biología y en la genética, que es la forma moderna por la cual las ciencias biológicas se aplican a temas interdisciplinarios como la biodiversidad.		
OBJETIVOS: <ul style="list-style-type: none"> ✓ Aplicar los conceptos de la mecánica clásica y la termodinámica a diferentes sistemas biofísicos. ✓ Brindar al estudiante las herramientas básicas que le permitan enfrentar problemas relacionados con sistemas biofísicos de manera clara y acertada, empleando simulaciones computacionales. ✓ Involucrar al estudiante en la reflexión sobre la importancia de conceptos fundamentales de la física en el área de la simulación computacional aplicada a sistemas biológicos, lo que fortalecerá su formación interdisciplinar al momento de ejercer su profesión tanto de educador como de investigador. 		
CONTENIDOS: <ol style="list-style-type: none"> 1. Introducción a las Simulaciones Computacionales 2. Introducción a la plataforma Linux y fundamentos de Shell Scripting 3. Método de Monte Carlo 4. Método de Car-Parinello 5. Método de Dinámica Molecular 6. Métodos Coarse Grain 7. Método de Dinámica Browniana 		

8. Elementos de Simulaciones Cuánticas
9. Elementos de Sistemas Clásicas-Cuánticas
10. Simulación tipo Monte Carlo en el ensamble Microcanónico
11. Simulación tipo Dinámica Molecular en ensambles Microcanónico, NPT, NVT
12. Técnicas de cálculo para energías Libres en Simulaciones Computacionales
13. Interacciones Clásicas en Sistemas BioMoleculares
14. Métodos de cálculo para interacciones Electroestáticas Sistemas BioMoleculares
15. Aplicaciones a BioSistemas
16. Métodos de cálculo para interacciones Electroestáticas Sistemas BioMoleculares
17. Fundamentos biofísicos y bioquímicos de moléculas orgánicas, proteínas y membranas biológicas
18. Elementos básicos de biología celular
19. Aplicaciones a BioSistemas
20. Solvatación y Poisson-Boltzmann
21. Simulaciones de Proteínas
22. Simulaciones de Membranas

METODOLOGIA:

Clases magistrales y Hands On con el computador.
Tutorías de los proyectos a realizar.

COMPETENCIAS		
BASICAS	Procesos de Aprendizaje	Habilidad para: a. Analizar datos experimentales, resultado de las simulaciones computacionales que se realicen. b. Identificar variables, establecer condiciones válidas para los problemas y/o la simulaciones planteadas. c. Identificar la pertinencia de la modelación o simulación que se plantee.
CIUDADANAS	Formación Social y Ciudadana	Desarrollar la capacidad para: a. Aplicar el conocimiento científico y tecnológico en pro del desarrollo socio cultural de las diferentes comunidades. b. Proponer proyectos alternativos en los que se apliquen los fundamentos de la simulación computacional a la solución de problemas medio ambientales. c. Socializar los resultados y alcances de los proyectos desarrollados en estas temáticas en eventos de carácter local, nacional e internacional. e. Contribuir e identificar las variables físicas, que tengan un impacto en el medio ambiente, en una situación determinada.
LABORALES	Relaciones Interpersonales	Habilidad para: a. Aportar y complementar a sus grupos de trabajo, conocimientos para solucionar problemas tanto teóricos como experimentales. b. Plantear alternativas para el desarrollo de procedimientos del trabajo experimental.

		<p>c. Confrontar y consensuar diferentes puntos de vista, a partir del diálogo argumentado.</p> <p>d. Distribuir y desarrollar tareas considerando diferentes niveles de responsabilidad, individual o grupal.</p>
	Desarrollo Cultural	<p>Habilidad para:</p> <p>a. Participar en grupos de trabajo o de investigación en el sector educativo como auxiliar de investigación, joven investigador o co investigador.</p> <p>b. Liderar procesos organizativos en el desarrollo de actividades experimentales y demás actividades grupales (seminarios, congresos, talleres)</p> <p>c. Utilizar software especializado para la modelación y/o simulación computacional de sistemas biológicos.</p> <p>d. Interpretar la idea principal y los argumentos expuestos en un texto en un segundo idioma.</p> <p>e. Diferenciar lenguaje común del lenguaje técnico considerando el sentido y significado físico y matemático de acuerdo con el contexto, desde la perspectiva del idioma del documento (inglés u otros).</p>

EVALUACION:

La evaluación tendrá un carácter eminentemente formativo, lo cual permite ir retroalimentando los procesos de enseñanza y de aprendizaje; ella será permanente durante el desarrollo del espacio académico, de tal manera que durante el proceso, por una parte, el profesor tenga una apreciación lo más objetiva posible acerca del trabajo y los progresos de los estudiantes y por otra, cada estudiante sea consciente de sus logros y falencias en su proceso formativo, lo que le posibilita adoptar estrategias para superar estas últimas.

El sistema de calificación estará acorde con la reglamentación vigente (Acuerdo 027 de diciembre de 1993 CSU).

BIBLIOGRAFÍA, HEMEROGRAFIA, CIBERGRAFIA GENERAL Y/O ESPECIFICA:

Essential Cell Biology, Bruce Alberts, Dennis Bray , Karen HopkinS ,Alexander Johnson , Julian Lewis , Martin Raff ,Keith Roberts, Peter Walter. Garland Science; 3 edition (March 27, 2009)

Computational Approaches to Biochemical Reactivity (Understanding Chemical Reactivity) [Hardcover] Gábor Náray-Szabó, Arieh Warshel Springer; 1st edition (April 30, 1997)

Computer Modeling of Chemical Reactions in Enzymes and Solutions (Wiley Professional) Arieh Warshel. Wiley-Interscience; 1 edition (March 1, 1997)

Protein Simulations, Volume 66: Advances in Protein Chemistry. Valerie Daggett. Academic Press; 1 edition (November 24, 2003)

Combining Quantum Mechanics and Molecular Mechanics. Some Recent Progresses in QM/MM Methods, Volume 59 (Advances in Quantum Chemistry). Sylvio Canuto, John R. Sabin. Academic Press; 1 edition (May 18, 2010)

Theoretical Biochemistry - Processes and Properties of Biological Systems, Volume 9 (Theoretical and Computational Chemistry). A. Eriksson. Elsevier Science; 1 edition (March 5, 2001)

Advances in Chemical Physics, Proteins: A Theoretical Perspective of Dynamics, Structure, and Thermodynamics (Volume 71) .Charles L. Brooks, Martin Karplus, B. Montgomery Pettitt. Wiley-Interscience; 1 edition (June 21, 1990)

Dynamics of Proteins and Nucleic Acids. J. Andrew McCammon, Stephen C. Harvey. Cambridge University Press (April 29, 1988)

Molecular Dynamics: An Overview of Applications in Molecular Biology (From the Series Topics in Molecular and Structural Biology) Goodfellow. CRC Press; 1 edition (January 4, 1991)

Energy Landscapes: Applications to Clusters, Biomolecules and Glasses (Cambridge Molecular Science). David Wales. Cambridge University Press; 1 edition (March 8, 2004)

Lectures On Statistical Physics And Protein Folding. Kerson Huang. World Scientific Publishing Company; illustrated edition edition (August 3, 2005)

Statistical Physics of Biomolecules: An Introduction. Daniel M. Zuckerman. CRC Press; 1 edition (June 2, 2010)

- Simulating the Physical World, Hierarchical Modeling from Quantum Mechanics to Fluid Dynamics
HJC Berendsen, Cambridge University Press 2007

- Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications
D. Frankel & B. Smit, Academic Press 2002

- Computer Simulation of Biomolecular Systems, Theoretical and Experimental Applications
Ed. W.F. van Gunsteren, P.K. Weiner & A.J. Wilkinson;
Vol 2 ESCOM 1992 & Vol3 KLUGER/ESCOM 1997

- The Art of Molecular Dynamics Simulation,
D.C. Rapaport, Cambridge University Press 1998

- Molecular Dynamics Simulation Elementary Methods,
J.M. Haile, John Wiley & Sons Inc 1992

- Computer Simulation of Solids,
M.P. Allen & D.J. Tildesley, Oxford Science Publications 2000

- Computational Statistical Mechanics (Studies in Modern Thermodynamics Series Vol 11)
W.G. Hoover, Elsevier 1991

- Thermodynamics and Kinetics for the Biological Sciences
G.G. Hammes, John Wiley & Sons Inc 2000

- Biological Thermodynamics
D.T. Haynie, Cambridge University Press 2001

- Towards a Thermodynamic Theory for Ecological Systems
S.E. Jorgensen & Y.M. Svirezhev, Elsevier 2004

Statistical Mechanics: Algorithms and Computations (Oxford Master Series in Statistical, Computational, and Theoretical Physics). Werner Krauth. Oxford University Press, USA (November 16, 2006)

An Introduction to Thermodynamics and Statistical Mechanics Keith Stowe. Cambridge University Press; 2 edition (June 11, 2007)

Introduction to Modern Statistical Mechanics. David Chandler. Oxford University Press, USA; 1 edition (September 17, 1987)

Statistical Mechanics: Theory and Molecular Simulation (Oxford Graduate Texts), Mark E. Tuckerman. Oxford University Press, USA (April 19, 2010)

Thermodynamics and Statistical Mechanics (Classical Theoretical Physics) (Volume 0) Walter Greiner (Author), Ludwig Neise, Horst Stöcker, D. Rischke. Springer (May 9, 1995).