



Curso en

Fundamentos del Modelamiento y Simulaciones Moleculares en Biología

Resultados de aprendizaje:

- Entender la teoría y aplicación de los métodos y herramientas básicas computacionales para modelar y simular sistemas y/o procesos biológicos a nivel molecular.
- Analizar e interpretar las trayectorias obtenidas de los sistemas moleculares y su aplicación en el ámbito científico o tecnológico.
- Utilizar software de modelamiento y visualización de moléculas biológicas.

Dirigido a:

Estudiantes o profesionales de las áreas de química, física, farmacia y bioquímica, ciencias de la computación.



Inicio de Clases

19 de enero



Duración

02 meses



Modalidad

Virtual



Inversión

S/. 750.00



Horario

Martes de 06:00 p.m. a 09:00 p.m.

Jueves de 06:00 p.m. a 08:00 p.m.



Contenido

Unidad

01

Introducción al modelamiento y simulaciones

- Conceptos previos.
- Definiciones: Modelamiento y Simulación.
- Campos de aplicación de las simulaciones.
- Introducción a las probabilidades: Teorema Ergódico.
- Fundamentos de simulaciones deterministas y aleatorias.

Unidad

02

Descripción de las interacciones moleculares

- Interacciones atómicas y moleculares. Clasificación de enlaces químicos. Reacciones químicas.
- Aplicación al modelamiento de moléculas y biomoléculas: Modelamiento de proteínas, ADN, membranas. Modelamiento de reacciones químicas.
- Simulaciones de mecánica clásica/cuántica. 'Forcefields'.

Unidad

03

Modelos atomísticos y CG

- Modelos atomísticos, coarse-grained.
- Simulaciones de dinámica molecular de proteínas, ácidos nucleicos, complejos droga-proteína.
- IA en las simulaciones moleculares.

Unidad

04

Proyectos ilustrativos

- Asignación y discusión de proyectos: limitaciones y alcances.
- Ejecución del proyecto y asesoría de parte del docente.
- Presentación final del proyecto: informe y exposición.

Docente



PhD. Wilfredo Evangelista Falcón

Investigador de la Universidad Peruana Cayetano Heredia, con amplia experiencia en análisis computacionales de datos biológicos, simulaciones moleculares de proteínas, ácidos nucleicos y compuestos. Egresado de física de la Universidad Nacional de Ingeniería, posteriormente obtuvo su Ph.D. en The University of Tennessee at Knoxville, concentrándose en el área de biofísica molecular computacional. Cuenta con publicaciones de alto impacto en los campos de biofísica molecular, simulaciones de dinámica molecular, virtual screening, alosterismo, entre otros.

Alcanza tus metas



Docentes Especializados
en el Campo



Cursos a medida



Networking

Más información



posgrado.ventas@ofcinas-upch.pe



967 303 546



posgrado.cayetano.edu.pe

Síguenos en:

