



Universidad Nacional de San Luis
Rectorado

"2016 - Año del Bicentenario de la Declaración de la Independencia Nacional"

ES COPIA
OSCAR GUILLERMO SEGURA
Director de Despacho
UNSL

SAN LUIS, 16 MAYO 2016

VISTO:

El Expediente EXP-USL: 2817/2016 mediante el cual se solicita la protocolización del Curso de Posgrado: **TERMODINÁMICA ESTADÍSTICA EN BIOLOGÍA – PARTE I**; y

CONSIDERANDO:

Que el Curso de Posgrado se propone dictar en el ámbito de la Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia del 25 de abril al 25 de noviembre de 2016, con un crédito horario de 90 horas presenciales y bajo la coordinación del Dr. Jorge VILA.

Que la Comisión Asesora de Posgrado de Ciencias Químicas de la Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia recomienda aprobar el curso de referencia.

Que el Consejo de Posgrado de la Universidad Nacional de San Luis en su reunión del 19 de abril de 2016, analizó la propuesta y observa que el programa del curso, bibliografía, metodología de evaluación y docentes a cargo, constituyen una propuesta de formación de posgrado de calidad en su campo específico de estudio.

Que, por lo expuesto, el Consejo de Posgrado aprueba la propuesta como Curso de Posgrado, según lo establecido en Ordenanza CS N° 23/09.

Que corresponde su protocolización.

Por ello y en uso de sus atribuciones

EL RECTOR DE LA UNIVERSIDAD NACIONAL DE SAN LUIS

RESUELVE:

ARTÍCULO 1°.- Protocolizar el dictado del Curso de Posgrado: **TERMODINÁMICA ESTADÍSTICA EN BIOLOGÍA – PARTE I**, en el ámbito de la Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia del 25 de abril al 25 de noviembre de 2016, con un crédito horario de 90 horas presenciales.

ARTÍCULO 2°.- Protocolizar como docente responsable del curso al Dr. Jorge VILA (DNI N° 10.274.686) del IMASL – UNSL.

Cpde RESOLUCIÓN R N° 686

Jorge Raúl Ortuño
Vice Rector - UNSL
Rectorado RR N° 644/16

Dra. Alicia Martínez
Secretaría de Posgrado
U.N.S.L.



Universidad Nacional de San Luis
Rectorado

~~ES COPIA~~
OSCAR GUILLERMO SEGURA
Director de Despacho
UNSL

ARTÍCULO 3°.- Aprobar el programa del Curso de referencia, de acuerdo al **ANEXO** de la presente disposición.-

ARTÍCULO 4°.- Comuníquese, insértese en el Libro de Resoluciones, publíquese en el Digesto Electrónico de la UNSL y archívese.-

RESOLUCIÓN R N° 686
may

Dra. Alicia Marnela Príncipe
Secretaria de Posgrado
U.N.S.L.

Ing. Jorge Raúl Oguin
Vicerrector - UNSL
a/c Rectorado RR N° 6 74/16



Universidad Nacional de San Luis
Rectorado

"2016 - Año del Bicentenario de la Declaración de la Independencia Nacional"

ES COPIA
OSCAR GUILLERMO SEGURA
Director de Despacho
UNSL

ANEXO

**DENOMINACIÓN DEL CURSO: TERMODINÁMICA ESTADÍSTICA EN BIOLOGÍA
– PARTE I**

UNIDAD ACADÉMICA RESPONSABLE: Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia

CATEGORIZACIÓN: Capacitación

RESPONSABLE: Dr. Jorge VILA

COORDINADOR: Dr. Jorge VILA

CRÉDITO HORARIO: 90 horas

MODALIDAD DE DICTADO: Presencial

FECHA DE DICTADO DEL CURSO: Noviembre de 2016

FECHA PREVISTA PARA ELEVAR LA NÓMINA DE ALUMNOS APROBADOS:
Diciembre de 2016

DESTINATARIOS: Egresados con título de grado universitario de 4 años o más en Biología Molecular y en disciplinas afines a la temática del curso.

LUGAR DE DICTADO: IMASL – UNSL

CUPO: 10 personas.

FUNDAMENTACIÓN: La Termodinámica Estadística consiste en el modelado de sistemas moleculares combinando conceptos de la física, la química y teoría de probabilidad. El modelado, aún de los sistemas más simples, provee información sobre como las moléculas interactúan. Es por ello que ideas y conceptos de la Termodinámica Estadística como: (i) entropía; (ii) función de distribución; (iii) energía; (iv) capacidad calorífica; (v) energía libre; y (vi) función de partición, son fundamentales para predecir el comportamiento de moléculas en sistemas biológicos. Mientras que el poder de la Termodinámica está en la generalidad, el poder de la Termodinámica Estadística está en proveer una aproximación a las interacciones microscópicas, entre moléculas, a través del modelado de los sistemas biológicos.

Una buena teoría, no importa cuán compleja sea matemáticamente expresarla, esta usualmente basada en ideas físicas simples. Quizás el ejemplo que mejor ilustre este concepto lo constituye el modelo bidimensional de un imán; el conocido modelo de *Ising*. La idea física del modelo es simple: flechas que apuntan hacia arriba y hacia abajo "representando" espines nucleares dispuestos en los vértices de una red infinita. ¿Su solución matemática? Una de las más complejas de la físico-matemática, resuelta analíticamente por Lars *Onsager* en 1944 (casi ~15 años después de la formulación original del modelo propuesto por *Ising*). La solución de *Onsager* fue una revolución en transiciones de fases y fenómenos críticos. Las analogías de este sistema físico (el modelo de *Ising*) a sistemas biológicos, como la conocida transición hélice/hebra en polipéptidos, son numerosas y sirven de claros ejemplos de la importancia del modelado molecular.

Cpde RESOLUCIÓN R N° 686

Jorge Raul Quijín
Vicerrector - UNSL
a/c Rectorado RR N°
674/16

Dra. Alicia Morales Primitista
Secretaría de Progrado
U.N.S.L.



Universidad Nacional de San Luis
Rectorado

"2016 - Año del Bicentenario de la Declaración de la Independencia Nacional"

ES COPIA
OSCAR GUILLERMO SEGURA
Director de Despacho
UNSL

OBJETIVOS: Lograr que el estudiante se acostumbre formular e interpretar modelos de sistemas biomoleculares. Al finalizar el curso se espera que el alumno entienda que el modelado, que es una figurilla de la realidad, es una herramienta crucial para la comprensión de sistemas complejos y que sirve de guía al pensamiento analítico. Parte crucial en la evaluación final de la materia será que cada alumno deberá modelar algún sistema biológico de interés en el cual este trabajando o tenga intenciones de trabajar.

A los alumnos interesados se les pedirá, como condición necesaria, tener conocimientos de biología estructural, al nivel del curso Optativo "Bioinformática Estructural" dictado para estudiantes de la Licenciatura en Biología Molecular (aprobado por Res. CD 028/13).

CONTENIDOS MÍNIMOS: Principios de Probabilidad; Máximos, Mínimos y Predicción del Equilibrio; Calor, Trabajo y Energía; Calculo Multivariado; Entropía y Ley de Boltzmann; Fundamentos de Termodinámica; La Lógica de la Termodinámica; Condiciones Experimentales y Energías Libres; Relaciones de Maxwell y Mezclas; La Ley de Distribución de Boltzmann; Mecánica Estadística de Gases Simples y Sólidos; Temperatura y Capacidad Calorífica; El Equilibrio Químico; Equilibrio entre Líquidos, Sólidos y Gases; Soluciones y Mezclas; Solvatación y la Transferencia de Moléculas Entre Fases.

PROGRAMA:

Tema 1: Fundamentos de probabilidad; ¿Qué es una probabilidad?; Reglas de probabilidad; Probabilidades condicionales; Combinatoria; Funciones de distribución; Promedios y desviaciones estándar;

Tema 2: ¿Qué son los principios extremos?; ¿Qué es un estado de equilibrio?; Maximizando la multiplicidad; Modelos simples.

Tema 3: Flujo de Calor y maximización de la entropía; Leyes de conservación; Energía de los átomos y moléculas; ¿Por qué el calor fluye?

Tema 4: El modelado físico involucra expansión de series; Hacer aproximaciones involucra truncar series; Distribución Gausiana; Paseo al azar. Funciones de variables múltiples; Derivadas parciales; Extremos e integración de funciones multivariadas; Regla de la cadena.

Tema 5: ¿Qué es la entropía?; Distribuciones planas en la ausencia de vínculos; Distribución exponencial en presencia de vínculos; Fundamentos filosóficos.

Tema 6: La termodinámica son dos leyes; Las ecuaciones termodinámicas fundamentales; Definiendo las fuerzas impulsoras de la termodinámica; Equilibrio térmico; mecánico y químico;

Tema 7: La lógica de la termodinámica; La primer ley interrelaciona calor, trabajo y energía; ¿Por qué hay una escala absoluta de temperatura?; Otros enunciados de la segunda ley.

Tema 8: Cambiando de entropía a energía libre; La energía libre define otro principio extremo; Usando la capacidad calorífica; Usando ciclos termodinámicos.

E. Jorge Raúl Olguín
Vicerrector - UNSL
a/c Rectorado RR N°
64126

Dra. Alicia Morales Piniasta
Secretaría de Posgrado
U.N.S.L.

Cpde RESOLUCIÓN R N° 686



Universidad Nacional de San Luis
Rectorado

"2016 - Año del Bicentenario de la Declaración de la Independencia Nacional"

ES COPIA
OSCAR GUILLERMO SEGURA
Director de Despacho
UNSL

Tema 9: Prediciendo cantidades no-medibles; Las relaciones de *Maxwell* y las derivadas parciales; Sistemas de multicomponentes; Cantidades molares.

Tema 10: Distribuciones de probabilidad para átomos y moléculas; La ley de Boltzmann describe el equilibrio; ¿Qué nos dice la Función de Partición? ¿Qué nos dice la Gran Función de Partición y el Conjunto Generalizado? ¿Qué es una asamblea?

Tema 11: Mecánica estadística de gases simples y sólidos; Propiedades macroscópicas de estructuras atómicas; Movimiento de traslación; El modelo del oscilador armónico; El modelo del rotor rígido; Propiedades del gas ideal; El teorema de equi-partición.

Tema 12: Una perspectiva microscópica; ¿Qué impulsa el intercambio calorífico? La capacidad calorífica refleja fluctuaciones de energía.

Tema 13: Equilibrio químico de estructuras atómicas; El principio de *Le Chatelier*; Dependencia del equilibrio con la temperatura.

Tema 14: Equilibrio de fases; La ecuación de *Clapeyron*; ¿Cómo funcionan las heladeras y las bombas de calor?; Tensión superficial.

Tema 15: Soluciones y mezclas; Un modelo de red para describir mezclas; Tensión interfacial; ¿Qué hemos dejado sin considerar?

Tema 16: El potencial químico; Solvatación; Actividad y el coeficiente de actividad; Elevación y disminución del punto de ebullición; Presión osmótica; Dimerización en solución.

SISTEMA DE EVALUACIÓN:

La evaluación consta de dos partes: (1) Evaluación continua durante el dictado del Curso, mediante la exposición de temas y resolución de ejercicios, y (2) Presentación de un trabajo final, individual, que consistirá en el modelado molecular de un sistema biológico, utilizando los conceptos del curso.

BIBLIOGRAFÍA:

1. Dill K. and Bromberg S. *Molecular Driving Forces* (Statistical Thermodynamics in Chemistry and Biology). Garland Science, New York, 2012.
2. Haynie, D.T. *Biological Thermodynamics*. 2nd Edition. Cambridge; New York: Cambridge University Press, 2008.
3. Israelachvili J.N. *Intermolecular and Surface Forces* (With Applications to Colloidal and Biological Systems). Academic Press, New York, 1985.
4. Jaynes, E.T. *Probability Theory: The Logic of Science*. Ed. G. Larry Bretthorst. Cambridge University Press, 2003.
5. Poland D. *Cooperative Equilibria in Physical Biochemistry*. Clarendon Press, Oxford, 1978.
6. Hill, T.L. *An Introduction to Statistical Thermodynamics*. New York: Dover Publications, 1987.

Cpde RESOLUCIÓN R N° 686

ing. Jorge Raúl Orquín
Vice Rector - UNSL
alc Rectorado RR N°
674/16

Dra. Alicia Marcela Primista
Secretaria de Posgrado
U.N.S.L.



Universidad Nacional de San Luis
Rectorado

"2016 - Año del Bicentenario de la Declaración de la Independencia Nacional"

ES COPIA
OSCAR GUILLERMO SESURA
Director de Desarrollo
UNSL

7. Krauth, W. *Statistical Mechanics: Algorithms and Computations*. PAP/CDR edition. Oxford University Press, 2006

ARANCEL: Gratuito.

COSTOS Y FUENTE DE FINANCIAMIENTO: IMASL – FQByF.

Cpde RESOLUCIÓN R N° 686
may

Dra. Alicia Marcela Prati
Secretaria de Posgrado
U.N.S.L.

Ing. Jorge Raul Olguin
Vicerrector - UNSL
a/c Rectorado RR N° 674/16