

FACULTAD DE CIENCIAS
EXACTAS Y NATURALES

Universidad Nacional de La Pampa

RESOLUCIÓN Nº 673

SANTA ROSA, 28 de octubre de 2022

VISTO:

El expediente Nº 951/2022 iniciado por la Secretaría de Investigación, Posgrado y Extensión, “S/ Curso: Dinámica molecular clásica. Conceptos básicos y aplicaciones”; y

CONSIDERANDO

Que la Dra. Griselda Mónica CORRAL y el Dr. Mario Guillermo CAMPO elevan una nota a la secretaria de Investigación, Posgrado y Extensión donde proponen el dictado del curso denominado **“Dinámica molecular clásica. Conceptos básicos y aplicaciones”**.

Que tendrá como docentes responsables a la Dra. Griselda Mónica CORRAL y al Dr. Mario Guillermo CAMPO y estará destinado a estudiantes avanzados de las licenciaturas en Física, Química y Ciencias Biológicas de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales.

Que el mismo se realizará desde el 18 de noviembre de 2022 al 31 de mayo de 2023.

Que el mencionado curso, cumple con lo requerido en el reglamento para la presentación de Actividades Académicas Extracurriculares de Grado y Posgrado de la Facultad, aprobado por Resolución Nº 574/21 CD.

Que cuenta con los avales del Departamento de Física, y de las Secretarías Académica y de Investigación, Posgrado y Extensión.

Que se presentan, además, características del curso como fundamentación, objetivos, carga horaria, bibliografía, cronograma y requisitos de aprobación.

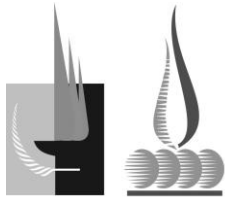
Que en la sesión ordinaria del 27 de octubre de 2022 el Consejo Directivo aprobó, por unanimidad, el despacho de la Comisión de enseñanza.

POR ELLO:

**EL CONSEJO DIRECTIVO DE LA
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES**

R E S U E L V E:

ARTÍCULO 1º.- Otorgar el aval académico al curso **“Dinámica molecular clásica. Conceptos básicos y aplicaciones”** que tendrá como docentes responsables a la



FACULTAD DE CIENCIAS
EXACTAS Y NATURALES

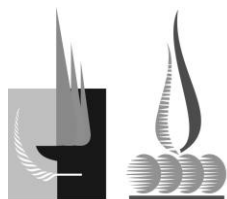
Universidad Nacional de La Pampa

CORRESPONDE A LA RESOLUCIÓN N° 673/22

Dra. Griselda Mónica CORRAL (DNI N° 13.956.628) y al Dr. Mario Guillermo CAMPO (DNI N° 17.608.091), y cuyas características constan en el Anexo de la presente Resolución. -

ARTÍCULO 2º.- Extender por Secretaría de Investigación, Posgrado y Extensión los certificados a las responsables del curso mencionado en el artículo 1º, y a las personas participantes.

ARTÍCULO 3º.- Regístrese, comuníquese. Pase a conocimiento del Departamento de Física, de las Secretarías Académica y de Investigación, Posgrado y Extensión y de las personas interesadas. Cumplido, vuelva.-



FACULTAD DE CIENCIAS
EXACTAS Y NATURALES

Universidad Nacional de La Pampa

CORRESPONDE A LA RESOLUCIÓN N° 673/22

ANEXO

a) Tipo de actividad

Curso de grado

b) Denominación del curso

Dinámica molecular clásica. Conceptos básicos y aplicaciones.

c) Organización

A cargo del y de la docente del curso.

d) Docentes

Dr. Mario Guillermo CAMPO

Dra. Griselda Mónica CORRAL

e) Fundamentos

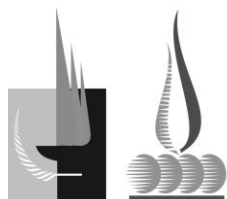
El método de dinámica molecular nace como una necesidad en distintas áreas de la ciencia con el fin de estudiar aquellas moléculas que no se pueden observar por medio de microscopía electrónica o que presentan tiempos de equilibrios en escalas tan pequeñas del orden de nanosegundos que no se pueden medir en el laboratorio, o que simplemente su dinámica molecular puede ser entendida con mayor claridad por medio de métodos numéricos y herramientas computacionales. También sus resultados resultan complementarios a otras técnicas experimentales. Entre algunas de las aplicaciones en que los métodos de simulación molecular han sido de gran ayuda, se pueden mencionar el estudio de macromoléculas como ADN, proteínas (desde su estructura primaria hasta la cuaternaria), modelización de nuevos materiales e inclusive cristales líquidos.

A pesar de que tradicionalmente se depende de resultados experimentales obtenidos por otras técnicas para poder parametrizar y validar los modelos de simulación molecular, lo que implica que la simulación ha seguido a la experimentación, muchas veces dichos roles se intercambian, es decir, la simulación ayuda a predecir resultados experimentales (con ello reduciendo la cantidad de recursos que se necesitan para la experimentación y el tratamiento de desechos) de manera confiable.

De aquí nace la importancia de revisar y estudiar aquellas herramientas que están siendo más utilizadas para el estudio de moléculas por simulación. En particular, es importante comprender los fundamentos por los cuales funciona el método de dinámica molecular clásica ya que, de lo contrario, se estaría realizando un proceso como si fuera una caja negra donde por "arte de magia" aparecen los resultados y no se conocen las restricciones del modelo.

f) Objetivos

Dotar a los/as participantes de las capacidades básicas para comprender y desarrollar el método de dinámica molecular clásica, quienes adquirirán los



FACULTAD DE CIENCIAS
EXACTAS Y NATURALES

Universidad Nacional de La Pampa

CORRESPONDE AL ANEXO DE LA RESOLUCIÓN Nº 673/22

rudimentos básicos para utilizar programas computacionales relacionados a dicho método y al análisis de sus resultados.

g) Modalidad de dictado

Presencial

h) Destinatarios/as

Estudiantes avanzados de Licenciatura en Física, Licenciatura en Química, y Licenciatura en Ciencias Biológicas.

i) Contenidos mínimos

Unidad 1: Conceptos generales de simulación por computadora de sistemas físicos.

Simulación computacional. Simulación por dinámica molecular. Los principios de la simulación. Condiciones periódicas de contorno.

Unidad 2: Las ecuaciones del movimiento en dinámica molecular.

Solución numérica. Resolución de ecuaciones mediante elementos finitos. El método de salto de rana. Algoritmos para resolución de las ecuaciones del movimiento. Método de Predicción-corrección. El algoritmo de Verlet.

Unidad 3: Dinámica molecular de sistemas simples. Potenciales de interacción discontinuos. Esferas rígidas. Sistemas moleculares. Dinámica molecular con restricciones posicionales. Baños térmicos e hidrostáticos.

Unidad 4: Potenciales de interacción en la modelización de átomos y moléculas.

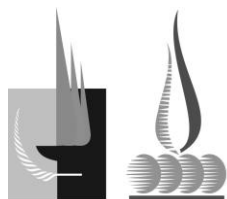
Interacciones de corto y largo alcance. Interacción de van der Waals. Interacción coulombiana. Dipolos y momentos multipolares de orden superior. Las sumas de Ewald. Campo de reacción. Interacción entre átomos ligados. Enlaces covalentes. Ángulos de enlace. Potenciales de torsión.

Unidad 5: El software GROMACS.

Ejemplos de aplicación al estudio de moléculas en solución: Glicina, beta-alanina, agua subenfriada, sorbitol, entre otros. Desarrollo de modelos de moléculas: topologías. Estabilización del sistema simulado. Programas de análisis de resultados. Criterios de fiabilidad de la simulación.

Unidad 6: Análisis de resultados.

Funciones de correlación espacial. Funciones de correlación dependientes del tiempo. Funciones de distribución radial. Formación de puentes de hidrógeno. Coeficientes de orden traslacional y orientacional. Funciones de correlación.



FACULTAD DE CIENCIAS
EXACTAS Y NATURALES

Universidad Nacional de La Pampa

Desplazamiento cuadrático medio y coeficiente de difusión. Enlaces, ángulos y diedros. Radio de giro y distancias.

CORRESPONDE AL ANEXO DE LA RESOLUCIÓN Nº 673/22

j) Cronograma de la AAE. Especificar tema, carga horaria teórica y práctica

Tema	Carga horaria Teórica / hs.	Carga horaria Práctica / hs.
Unidad 1	4	6
Unidad 2	6	10
Unidad 3	6	10
Unidad 4	6	10
Unidad 5	6	15
Unidad 6	6	15
Totales	34	66

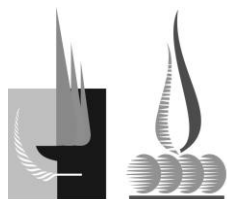
Nota: La carga horaria práctica se completa con actividades no presenciales por parte de los/las participantes. La frecuencia de las clases será de una clase teórica y una clase práctica semanal, interrumpiéndose en los recesos y feriados académicos. Las fechas y horarios se ajustarán de acuerdo a las posibilidades de estudiantes y docentes.

k) Metodología de abordaje académico

Se utilizará un Aula del Campus Virtual de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, en el cual se aprovecharán todos los recursos disponibles que resulten de utilidad para el desarrollo del curso. Se procederá inicialmente en cada unidad con clases presenciales, en las cuales las mismas se expondrán los principales conceptos, se indicará la dinámica de trabajo y la bibliografía. Cada unidad contará con actividades prácticas que permitirán reafirmar los conceptos tratados, algunas de ellas no presenciales. A medida que avance el curso, los/as estudiantes desarrollarán una dinámica molecular clásica de una molécula en solución, ya sea alguna que resulte de su interés o bien propuesta por el o la docente del curso. Esta tarea permitirá desarrollar parte de las actividades prácticas de cada unidad, precisamente aquellas referidas a las aplicaciones del método a áreas de interés. Oportunamente, también como parte de las actividades prácticas, los/as estudiantes presentarán sus resultados parciales al conjunto para socializar sus resultados, como una estrategia de aprendizaje común, y de evaluación procesual. Se permitirá el trabajo en grupo, para fomentar el trabajo colaborativo.

l) Carga horaria total

100 horas.



FACULTAD DE CIENCIAS
EXACTAS Y NATURALES

Universidad Nacional de La Pampa

CORRESPONDE AL ANEXO DE LA RESOLUCIÓN Nº 673/22

m) Bibliografía

Sato, A., (2011) Introduction to Practice of Molecular Simulation, Elsevier, Burlington, USA.

Rapaport, D. C., (2004) The Art of Molecular Dynamics simulation (Second Edition), Cambridge University Press, New York, USA.

Frenkel, D., (2002) Understanding Molecular simulation, Academic Press, Florida, USA.

Gould, H., Tobochnik, J. (2002) Computer Simulation Methods, Addison Wesley, New York, USA.

Sadus, J., (2002) Molecular Simulation of Fluids, Elsevier, Sydney, AU.

Allen, M. P. Tildesley, D. J. (1991). Computer simulation of liquids, Clarendon Press, Oxford.

Bauer, P., Hess, B., Lindahl, E. (2022). GROMACS 2022.3 Manual (2022.3). Zenodo. <https://doi.org/10.5281/zenodo.7037337>

Van Gunsteren, W. F. (1980). Mol. Phys. 40, 1015-1019.

Van Gunsteren, W. F. y Berendsen, H. J. C. (1977) . Mol. Phys. 34, 1311-1327.

Van Gunsteren, W. F. y Berendsen, H. J. C. (1982). Mol. Phys. 45, 637-647.

Van Gunsteren, W. F., Berendsen, H. J. C. y Rullman, J.A.C. (1978). Faraday Discuss Chem. Soc. 66, 58-70.

Verlet, L. (1967). Phys. Rev. 159, 98-103.

Verlet, L (1968). Phys. Rev. 165, 201-214.

Hansen ,I.P., Levesque D. & Weiss J.J. (1979). Phys. Rev. Lett. 43, 979-982.

Krakty K.W. (1980). J. Comp. Phys. 37, 205-217.

Krakty K.W. & Scheiner W. (1982). J. Comp. Phys. 47, 313-320.

Grigera J.R., Kalko S. y Fischbarg J. (1996). Langmuir 12, 154-158.

Stratt R.M., Holmgren S.L. & Chandler D.(1981) Mol. Phys, 42, 123,3-1243.

Goldstein, H., Poole P. C. Jr., Safko, J. L. (2014) Classical Mechanics, Third edition, Pearson, Essex.

Zhou, K., Liu, B. (2022) Molecular dynamics simulation, Elsevier, Amsterdam.

n) Cupo

10 estudiantes.

o) Arancel

Sin costo.

p) Requerimiento de espacios físicos, medios tecnológicos, plataformas virtuales, etc.

Se utilizará un espacio ya disponible en la plataforma virtual de la FCEyN, y computadoras también ya disponibles en la institución.

q) Lugar de realización

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales de la UNLPam.



CORRESPONDE AL ANEXO DE LA RESOLUCIÓN Nº 673/22

r) Inscripción

A cargo de SIPE UNLPam, mediante el formulario correspondiente.

s) Fecha de inicio y finalización del curso

Las fechas propuestas son aproximadas, y están sujetas a la aprobación del curso por parte de las autoridades correspondientes.

Inicio: 18/11/22

Final: 31/05/23

t) Sistema de evaluación, con aclaración de nota numérica y condiciones mínimas de aprobación en caso de corresponder.

La aprobación del curso se obtendrá con una nota mínima de 7 (posibles notas entre 1 y 10), a partir de la evaluación de la presentación de todas las actividades prácticas propuestas. Las actividades prácticas serán individuales o grupales, y presenciales o no presenciales. Se tratará de ejercicios prácticos que afianzarán la teoría, realización de ejemplos con programas computacionales provistos por los docentes, desarrollo de simulaciones y análisis de resultados. Algunas de las actividades prácticas se socializarán mediante presentaciones escritas o documentales y exposiciones orales.

Para la evaluación en general de las actividades prácticas se tendrá en cuenta el dominio del tema, la organización y presentación, resultados discusiones y conclusiones, y el manejo bibliográfico. En particular para las presentaciones escritas o documentales se considerará además la ortografía y redacción, y en las presentaciones orales (con power point o similar) se tendrán en cuenta la portada de la exposición, relación entre el texto y la imagen, vocabulario, diseño, y exposición.

u) Certificado

De asistencia en caso de no aprobar las actividades prácticas y asistir al menos al 80 % de las clases.

De aprobación en caso de cumplir con los requisitos descriptos en el ítem t.

GABRIELA R. VIDCOZ
Secretaría Consejo Directivo
Facultad Cs. Exactas y Naturales