**ANEXO I**

1. **Tipo de actividad:** Curso
2. **Nombre de la actividad:** Introducción a la dinámica molecular
3. **Docentes:** Dres. Griselda M. CORRAL y Mario G. CAMPO
4. **Fundamentación:**

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.

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 ha dependido de sus resultados para poder parametrizar y validar los modelos de simulación molecular, lo que implica que la simulación ha seguido a la experimentación, se espera que en un corto tiempo dichos roles sean intercambiados, es decir, que la simulación ayude 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, y que dichos esfuerzos fructifiquen en otras áreas del conocimiento y que resuelvan problemas tecnológicos.

De aquí nace la importancia de revisar aquellas herramientas que están siendo más utilizadas para el estudio de estas moléculas. En particular, es importante comprender los fundamentos por los cuales funciona el método de dinámica molecular, 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.

1. **Objetivos**

Dotar a los participantes de las capacidades básicas para comprender y desarrollar el método de dinámica molecular computacional. El participante de este curso adquirirá los rudimentos básicos para utilizar programas computacionales de dinámica molecular para estudiar el comportamiento de moléculas, y realizar el análisis de los resultados obtenidos.

1. **Programa:**

**Unidad 1**.- Simulación computacional. Simulación por dinámica molecular. Los principios de la simulación. Condiciones de contorno. Condiciones periódicas. Caja ortogonal.

**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. 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. Temperatura y presión. La temperatura del sistema. La presión.

**Unidad 4**.- Potenciales de interacción. Interacciones de corto y largo alcance. Interacción de van der Waals. Interacción culombiana. 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.-** Análisis de resultados. Introducción. Funciones de correlación espaciales. Funciones de correlación dependientes del tiempo. Funciones de distribución radial. Formación de puentes de hidrógeno. Coeficientes de orden traslacional y orientacional. Funciones de correlación. Desplazamiento cuadrado medio y coeficiente de difusión. Enlaces, ángulos y diedros. Radio de giro y distancias.

**Unidad 6.-** El software GROMACS. Aplicación al estudio de moléculas en solución: Glicina, beta-alanina, agua sub-enfriada, sorbitol, entre otros. Desarrollo de modelos de moléculas: topologías. Estabilización del sistema simulado. Programas de análisis de resultados. Criterios de fiabilidad de la simulación.

1. **Bibliografía**

Satoh, 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.

GROMACS Groningen Machine for Chemical Simulations, USER MANUAL, (27/10/17) (ftp://ftp.gromacs.org/pub/manual/manual-5.0.4.pdf)

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. (1980) Classical Mechanics. Addison-Wesley, New York.

1. **Carga horaria**:

Total 100 horas. 30 horas presenciales, 70 horas no presenciales. Se prevé un alto porcentaje de horas no presenciales para el desarrollo de topologías y simulaciones, bajo la acción tutorial de los docentes del curso.

1. **Destinatarios:** Estudiantes avanzados y graduados de Licenciatura en Física y Licenciatura en Química.
2. **Cupo:** 10 participantes
3. **Arancel:** Sin costo para estudiantes, docentes y graduados de la UNLPam. $1000 para quienes no cumplan estos requisitos.
4. **Requisitos de aprobación:** 80 % de asistencia a las clases presenciales. Presentación de las actividades propuestas en el curso.