Ministerio de Cultura y Educación **(Programa del año 2021)**
Universidad Nacional de San Luis
Facultad de Ciencias Físico Matemáticas y Naturales
Departamento: Fisica
Area: Area Unica - Física

I - Oferta Académica

Materia	Carrera	Plan	Año	Período
(MATERIA OPTATIVA I) MODELADO MOLECULAR:INTRODUCCION A LA DINAMICA MOLECULAR Y OTRAS TECNICAS DE SIMULACION	LIC.EN FISICA	015/0	2021	2° cuatrimestre

6

II - Equipo Docente

Docente	Función	Cargo	Dedicación
PORASSO, RODOLFO DANIEL	Prof. Responsable	P.Adj Exc	40 Hs

III - Características del Curso

Credito Horario Semanal				
Teórico/Práctico	Teóricas	Prácticas de Aula	Práct. de lab/ camp/ Resid/ PIP, etc.	Total
4 Hs	4 Hs	Hs	Hs	8 Hs

Tipificación	Periodo
C - Teoria con prácticas de aula	2º Cuatrimestre

Duración			
Desde	Hasta	Cantidad de Semanas	Cantidad de Horas
23/08/2021	26/11/2021	14	112

IV - Fundamentación

El curso se dicta como materia optativa orientada a la formación superior de Licenciados en Física, que deseen profundizar sus conocimientos en el estudio y descripción del comportamiento de sistemas biológicos, en el marco de las simulaciones computacionales de Dinámica Molecular y otras técnicas de simulación. Además deben realizar trabajos prácticos de simulación de modo que el alumno aprenda algunas herramientas útiles para su formación y posterior desarrollo de trabajo final tanto en esta temática como en otras posibles.

V - Objetivos / Resultados de Aprendizaje

• Que el alumno se familiarice con los fundamentos e implementaciones de los métodos teóricos que se emplean para modelar las propiedades de moléculas, macromoléculas y agregados moleculares mediante el uso de computadoras.
• Que el alumno aprenda las nociones de las herramientas básicas para cualquier simulación en materia condensada.
• Que el alumno adquiera los conocimientos necesarios para la programación de la simulación de un sistema molecular simple mediante la Dinámica Molecular.
• Que alumno aprenda sobre los métodos estocásticos, conocidos genéricamente con el nombre de métodos de Monte Carlo.
• Que el alumno aprenda a analizar los resultados obtenidos de las simulaciones por Dinámica Molecular.

VI - Contenidos

Unidad 1. Introducción a la Simulación en ordenador de sistemas moleculares

• Introducción a la problemática general del cálculo numérico.

• Problemas básicos. Tamaño de la configuración espacial. Precisión del modelo molecular y del campo de fuerzas.

• Simplificaciones y limitaciones. Masas puntuales. Tamaño del sistema o número de grados de libertad a ser incluidos. Muestreo de la configuración espacial y escala de tiempo de los procesos. Precisión del modelo molecular y del campo de fuerzas.

• Elección del modelo molecular y campo de fuerzas. Campo de fuerzas. Polarizabilidad. Tratamiento de las Fuerzas Coulombicas de largo alcance. Dependencia espacial de la constante dieléctrica.

• Condiciones de contorno del sistema: Simulaciones en vacío. Simulaciones en condiciones periódicas.

Unidad 2. Diferentes tipos de Dinámica Molecular

• Simulaciones de Dinámica Molecular a temperatura constante. Métodos fijos.

• Métodos débilmente acoplados.

• Dinámica Molecular a presión constante.

• Modelos de Coarse-Grain para sistemas muy grandes o que requieren grandes escalas de tiempo.

Unidad 3. Propiedades típicas a analizar

• Propiedades Estáticas.

• Propiedades Dinámicas.

• Propiedades de Termodinámicas Simples: Energía Cinética. Energía Potencial. Temperatura. Presión. Fuerza promedio. Capacidad Calorífica.

• Cálculo de la energía libre. Método Tradicional: Ciclo Termodinámico de multiples ventanas. Método a partir del "Potential of Mean Force": Umbrella Sampling, Weighted Histogram Analysis Method.

Unidad 4. Ejemplos y Aplicaciones

• Ejemplos y aplicación de los distintos temas desarrollados a sistemas moleculares con relevancia biológica: Bicapas de Membranas Lipídicas, Proteínas. Interacciones entre pequeñas moléculas y Membranas Lipídicas: Perfil de la Energía Libre.

• Seminario por parte de los alumnos, el cual consistirá en la aplicación de algún método desarrollado en el curso al tema de interés particular de cada alumno, relacionado con un tema de su interés.

VII - Plan de Trabajos Prácticos

Los trabajos prácticos estarán destinados a la formación integral en la técnica de simulación.

Práctico 1: Uso del sistema operativo linux

Práctico 2: Introducción a las simulaciones por Dinámica Molecular.

Práctico 3: Análisis de las simulaciones.

Práctico 4: El alumno deberá simular un sistema que él proponga.

VIII - Regimen de Aprobación

Por promoción sin examen.

El alumno deberá tener una asistencia mínima a clases del 70%.

Deberá aprobar el total de los trabajos prácticos que se ha propuesto realizar.

Deberá exponer en forma oral un tema referido al contenido del curso.

IX - Bibliografía Básica

[1] Attwood, T. K. and Parry-Smith, D. J. "Introducción a la Bioinformática", Prentice Hall, 2002.

[2] Binder, K. "Montercarlo Method in Statistical Physics", Springer, Berlin, 1986.

[3] Chapman, S. J. "Fortran 99/95 for Scientists and Engineers", McGraw Hill, 2004.

[4] Frenkel, D.; Smit, B. "Understanding Molecular Simulation. From Algorithms to Applications", Academic Press, 1996.

[5] Gould, H.; Tobochnik, J. "An Introduction to Computer Simulation Methods. Applications to Physical Systems", 2nd edition; Addison- Wesley, 1996.

[6] Hinchliffe, A. "Molecular Modelling for Beginners", Wiley, 2003.

[7] Höltje, H. F.; Sippl, W.; Rognan, D. and Folkers G. “Molecular Modelling. Basic Principles and Applications. Second Edition”, Wiley-VCH, 2003.

X - Bibliografia Complementaria

[1] Leach, A. R. “Molecular Modelling. Principles and Applications. Second Edition”, Prentice Hall, 2nd edition, 2001.
[2] MacKeown, P. K. “Stochastic Simulation in Physics”, Springer, 1997.

XI - Resumen de Objetivos

Que el alumno aprenda los conceptos de las distintas técnicas de simulación computacional. Comprendiendo cuál es la adecuada según el sistema y la propiedad que se desea estudiar.

XII - Resumen del Programa

Unidad 1. Introducción a la Simulación en ordenador de sistemas moleculares
Unidad 2. Diferentes tipos de Dinámica Molecular
Unidad 3. Propiedades típicas a analizar
Unidad 4. Ejemplos y Aplicaciones

XIII - Imprevistos

El presente programa puede presentar ajustes dada la situación epidemiológica por COVID-19. Toda modificación será acordada y comunicada con el estudiantado e informada a Secretaría Académica.

XIV - Otros