



Ministerio de Cultura y Educación  
 Universidad Nacional de San Luis  
 Facultad de Ciencias Físico Matemáticas y Naturales  
 Departamento: Física  
 Area: Area Unica - Física

(Programa del año 2026)  
 (Programa en trámite de aprobación)  
 (Presentado el 22/03/2026 18:25:15)

### I - Oferta Académica

Materia	Carrera	Plan	Año	Período
( ) MODELADO MOLECULAR:INTRODUCCION A LA DINAMICA MOLECULAR Y OTRAS TECNICAS DE SIMULACION	LIC.EN FISICA	015/0	2026	1° cuatrimestre

6

### II - Equipo Docente

Docente	Función	Cargo	Dedicación
PORASSO, RODOLFO DANIEL	Prof. Responsable	P.Asoc Exc	40 Hs
FRIGINI, EZEQUIEL NAZARENO	Responsable de Práctico	JTP Exc	40 Hs

### III - Características del Curso

Credito Horario Semanal				
Teórico/Práctico	Teóricas	Prácticas de Aula	Práct. de lab/ camp/ Resid/ PIP, etc.	Total
7 Hs	Hs	Hs	Hs	7 Hs

Tipificación	Periodo
C - Teoria con prácticas de aula	1° Cuatrimestre

Duración			
Desde	Hasta	Cantidad de Semanas	Cantidad de Horas
11/03/2026	26/06/2026	15	112

### IV - Fundamentación

El curso se ofrece como materia optativa orientada a la formación avanzada de estudiantes de la Licenciatura en Física interesados en profundizar sus conocimientos en la descripción y el análisis del comportamiento de sistemas, en particular de interés biológico, mediante el uso de simulaciones computacionales basadas en Dinámica Molecular y otras técnicas afines. Asimismo, contempla la realización de trabajos prácticos de simulación que permitan al estudiante adquirir competencias en el uso de herramientas específicas, relevantes tanto para el desarrollo de trabajos finales en esta temática como para su aplicación en otros contextos de la física computacional.

### V - Objetivos / Resultados de Aprendizaje

- Que el estudiante 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 estudiante aprenda las nociones de las herramientas básicas para cualquier simulación en materia condensada.
- Que el estudiante adquiera los conocimientos necesarios para la programación de la simulación de un sistema molecular simple y complejo, mediante la Dinámica Molecular.
- Que el estudiante aprenda sobre los métodos estocásticos, conocidos genéricamente con el nombre de métodos de Monte

Carlo.

- Que el estudiante 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.

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 estudiantes, el cual consistirá en la aplicación de algún método desarrollado en el curso al tema de interés particular de cada estudiante, 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 estudiante deberá simular un sistema que él proponga.

## VIII - Regimen de Aprobación

Por promoción sin examen.

El estudiante 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 - Bibliografía 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 estudiante 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

Toda modificación será acordada y comunicada con el estudiantado e informada a Secretaría Académica.

## XIV - Otros

<b>ELEVACIÓN y APROBACIÓN DE ESTE PROGRAMA</b>	
	<b>Profesor Responsable</b>
Firma:	
Aclaración:	
Fecha:	