

Simulaciones de Dinámica Molecular: Teoría, Implementación y Aplicaciones

Curso de Posgrado a ser dictado en FaMAF – Mayo de 2009

Profesor: Dr. Marcelo A. Carignano (Purdue University)

Programa:

1. Simulaciones atomísticas y su alcance
 - Superficies de energía potencial
 - Conceptos generales de cálculos cuánticos y su relación con simulaciones clásicas
 - El problema de modelar la interacción entre moléculas
 - Mecánica estadística y simulaciones de Monte Carlo en diferentes ensambles
2. Simulaciones de dinámica molecular
 - Base teórica
 - Escalas de longitud y tiempo relevantes experimentalmente, y las posibilidades en simulaciones
 - Algoritmos de integración
 - Control de temperatura y presión
3. GROMACS: un programa de simulaciones con código abierto
 - Topología, conformación inicial y control de la simulación
 - Ejemplos de simulaciones simples
 - Análisis de la trayectoria obtenida durante la simulación
4. Campos de fuerza (Force Fields)
 - Interacciones no ligadas:
 - Potencial de Lennard-Jones
 - Potencial de Buckingham
 - Interacciones Coulombianas
 - Interacciones ligadas
 - Ligaduras armónicas, cuárticas y cúbicas
 - Potencial de Morse
 - Potencial FENE: modelos de cadenas poliméricas
 - Potenciales angulares: armónico, coseno, cuártico
 - Potencial Urey-Bradley
 - Potencial diedral impropio
 - Potencial diedral propio: periódico, Ryckaert-Bellemans, Fourier
 - Interacciones entre cuartos vecinos (1-4 interactions)

- Sitios virtuales
- 5. Interacciones de largo alcance
 - Sumas de Ewald
 - Sumas de Ewald sobre una grilla (Particle-mesh Ewald summation)
- 6. Modelos de agua como ejemplo típico: MCY, SPC/E, TIPnP, six-sites.
 - Descripción del agua usando simulaciones por computadora.
 - Diagrama de fase del agua, y diagrama de fase de los modelos de agua
- 7. El campo de fuerza OPLS como un ejemplo de interacciones en biomoléculas
- 8. Simulación de proteínas
 - Protein Data Bank
 - Preparación del sistema
 - Ejemplo: simulación de una cadena corta
- 9. Integración termodinámica
 - Potencial químico
 - Potenciales de fuerza media
 - Diferencia de energía libre entre dos estados

Textos:

“Understanding Molecular Simulation From Algorithms to Applications”
por Daan Frenkel and Berend Smit.

“Gromacs manual v.4” by D. van der Spoel, E. Lindhal and B. Hess.

Carga horaria: 2 horas de clase por día, de lunes a viernes. 18 días de clase en total

Prácticas en computadoras: 15 horas en total

Comienzo previsto: 11 de Mayo de 2009

Evaluación: Presentación de las prácticas asignadas durante la clase, y conclusión de un proyecto simple al final del curso.