



Cinvestav

# SIMULACIÓN MOLECULAR

Doctorado en Ciencias Químicas

Cinvestav

19 de Febrero del 2008

## TEMARIO

- Sistemas modelo y potenciales de interacción.
- Repaso de mecánica estadística.
  - Ensamblajes y muestreo.
  - Promedios termodinámicos y fluctuaciones.
  - Funciones de correlación temporales.
- Dinámica newtoniana y hamiltoniana.
  - El espacio fase.
  - Principios de conservación.
  - Condiciones a la frontera.
- El método de diferencias finitas para resolver las ecuaciones de movimiento.
  - Algoritmo de Verlet.
  - Predictor-corrector.
  - Esferas duras. Condiciones iniciales.
- Métodos de Monte Carlo.
  - El método de Metropolis.
  - Monte Carlo isotérmico-isobárico.
  - Monte Carlo gran canónico.
  - Líquidos moleculares.
- Modelado Biomolecular
  - Proteínas
  - Ácidos nucleicos
  - Análisis conformacional
  - Anclaje molecular. Diseño de fármacos
- Análisis de resultados.
  - Factores de estructura.
  - Funciones de correlación.
  - Estimación de errores.