

Nombre del Curso Curso Teórico-Práctico de Introducción a las Simulaciones Computacionales de Dinámica Molecular	Fechas 1-19 de Agosto de 2011
Contacto Ángel Piñeiro. Grupo de Materia Blanda y Biofísica Molecular, Universidad de Santiago de Compostela Correo electrónico: Angel.Pineiro@usc.es	Horas 30 Horas (15 Presenciales + 15 Trabajo Personal)
Expectativas y Conocimientos previos En este curso se pretende introducir la teoría en la que se basan las simulaciones computacionales de dinámica molecular así como aplicar esta metodología al estudio de varios sistemas modelo en diferentes escalas de resolución, tamaño y tiempo de simulación. Al finalizar el curso se espera que los estudiantes: <ul style="list-style-type: none"> - Entiendan el potencial y las limitaciones de los métodos de simulación de dinámica molecular para estudiar diferentes tipos de sistemas en modelos realistas de su entorno natural - Sean capaces de entender y valorar publicaciones basadas en simulaciones de dinámica molecular de varios sistemas, incluyendo péptidos, proteínas y/o modelos de membranas - Utilizar alguno de los programas más típicos para realizar simulaciones computacionales de dinámica molecular - Logren hacer un análisis básico de las trayectorias que resultan de las simulaciones de dinámica molecular de sistemas simples - Sean capaces de diseñar y realizar por sí mismos simulaciones de dinámica molecular de sistemas muy simples Los estudiantes deberían estar familiarizados con: <ul style="list-style-type: none"> - mecánica clásica, algebra vectorial y matricial, conocimientos básicos de entorno Linux 	

Descripción de contenidos

1. Introducción
2. Principios Generales: algoritmos básicos, campos de fuerza, condiciones periódicas de contorno, termostatos, barostatos, interacciones electrostáticas, restricciones y fuerzas especiales
3. Programas: motores de MD, visualizadores moleculares y generadores de gráficas
4. Análisis de trayectorias para sistemas representativos: estructura, comportamiento dinámico e interacciones con las moléculas del entorno
5. Limitaciones y trucos: métodos de resolución multiescala y mapeado bidireccional
6. Aplicaciones y ejemplos: plegamiento y desplegamiento de péptidos y proteínas, membranas y proteínas de membrana, simulaciones de moléculas en interfases, agregación supramolecular

Prácticas:

Se propondrán ejercicios en los que los estudiantes deberán diseñar y ejecutar simulaciones sencillas y analizar trayectorias simples

Referencias Básicas

H. J. C. Berendsen (2007) *Simulating the Physical World*. Cambridge University Press. ISBN: 978-0-521-83527-5

M. P. Allen, D. J. Tildesley (1989) *Computer simulation of liquids*. Oxford University Press. ISBN 0-19-855645-4

D. Frenkel, B. Smit (2002) *Understanding Molecular Simulation: from algorithms to applications*. Academic Press. ISBN 0-12-267351-4

Comentarios adicionales

- 1.- Se impartirán dos clases de 2.5 horas por clase cada semana entre el 1 y el 19 de Agosto de 2011. Se pedirá a los alumnos una serie de ejercicios para lo cual se espera que dediquen un tiempo aproximado de 15 horas adicionales. Al final del curso cada alumno entregará un informe de su trabajo.
- 2.- Cada alumno debería disponer de un ordenador con un sistema linux instalado (preferiblemente una versión anterior a la 11.00 de Ubuntu). Todos los programas instalados son de libre distribución y veremos en las clases cómo instalarlos en una cuenta local.
- 3.- Para el buen funcionamiento del curso se requiere un número de estudiantes mínimo de 8 y máximo de 15
- 4.- El curso va dirigido a estudiantes de último(s) semestre(s) de Licenciatura o Posgrado