



## Principios básicos de las simulaciones de dinámica molecular

Angel David Reyes Figueroa

Chemistry Department, Western University, London, Ontario, Canada

[areyesfi@uwo.ca](mailto:areyesfi@uwo.ca)

A pesar de los numerosos avances tecnológicos, las herramientas experimentales no son capaces de tener resoluciones espaciales ni temporales en los rangos de picómetros y femtosegundos respectivamente [1]. Para alcanzar esas resoluciones, podemos hacer uso de simulaciones computacionales, las cuales hacen uso de principios teóricos y datos experimentales para poder comprender propiedades estructurales de cúmulos de moléculas y las interacciones entre ellas [2]. Es importante entender las simulaciones computacionales como un complemento a los métodos experimentales convencionales, ya que cuentan con diversas limitaciones dependiendo del nivel de precisión teórica que queramos aplicar. Existen diversas técnicas de simulación computacional, sin embargo, en esta charla nos concentraremos en las simulaciones de dinámica molecular (SDM), las cuales tienen la ventaja de describir la evolución espacio-temporal del sistema que queramos estudiar, y con ello calcular diferentes propiedades dinámicas, tales como los coeficientes de transporte [3], respuestas dependientes del tiempo a perturbaciones [4] y reología [5]. Las SDM sirven como un microscopio computacional, que nos permiten tener una visión más clara de lo que ocurre a nivel atómico/molecular, y así poder generar puentes entre la información micro y macroscópica [6].

La presente charla busca introducir las SDM a un público no familiarizado con dicha área, se discuten las diferentes escalas en las que se puede trabajar haciendo uso de la técnica computacional, las implicaciones teóricas y computacionales que tiene cada nivel y, como esto se traduce en limitaciones en escalas espacio-temporales. Se profundizan los conceptos básicos empleados en las SDM, haciendo uso de simuladores e imágenes para facilitar su comprensión. Además, se presentan diversos ejemplos de temas de estudio que se pueden

abordar haciendo uso de las SDM, particularmente se discute una SMD aplicada a la anestesia general con el xenón como modelo de anestésico [7].

<https://sites.google.com/view/apcmac/conferencias-y-m%C3%B3dulos-2021?authuser=0#h.c63fmmntq50f>

### Referencias

- [1] Smolyaninov, Igor I. "Optical microscopy beyond the diffraction limit." (2008): 129-131.
- [2] Karplus, M., & McCammon, J. A. (2002). Molecular dynamics simulations of biomolecules. *Nature structural biology*, 9(9), 646-652.
- [3] Baştuğ, T., & Kuyucak, S. (2005). Temperature dependence of the transport coefficients of ions from molecular dynamics simulations. *Chemical physics letters*, 408(1-3), 84-88.
- [4] Puosi, F., Rottler, J., & Barrat, J. L. (2014). Time-dependent elastic response to a local shear transformation in amorphous solids. *Physical Review E*, 89(4), 042302.
- [5] Voeltzel, N., Giuliani, A., Fillot, N., Vergne, P., & Joly, L. (2015). Nanolubrication by ionic liquids: molecular dynamics simulations reveal an anomalous effective rheology. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 17(35), 23226-23235.
- [6] Dror, R. O., Dirks, R. M., Grossman, J. P., Xu, H., & Shaw, D. E. (2012). Biomolecular simulation: a computational microscope for molecular biology. *Annual review of biophysics*, 41, 429-452.
- [7] Reyes-Figueroa, A. D., Karttunen, M., & Ruiz-Suárez, J. C. (2020). Cholesterol sequestration by xenon nano bubbles leads to lipid raft destabilization. *Soft Matter*, 16(42), 9655-9661.