



### **1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:**

**Título:** Simulaciones de dinámica molecular de sistemas químicos

**Descripción general** (resumen y metodología):

Los científicos Martin Karplus, Michael Levitt y Arieh Warshel fueron galardonados en 2013 con el Nobel en Química por el desarrollo de procedimientos computacionales para el estudio de sistemas químicos complejos.

Tomando como punto de partida sus discursos de aceptación del citado premio y llevando a cabo la revisión bibliográfica pertinente, el alumno realizará un estudio de las contribuciones más relevantes de dichos autores al campo de la química computacional.

Como herramienta metodológica fundamental, se utilizará el programa de cálculo de dinámica molecular NAMD, así como programas de visualización de trayectorias de dinámica molecular VMD. Usando estos programas, se llevarán a cabo estudios computacionales de dinámica molecular sobre distintas proteínas y se analizará el efecto de mutaciones sobre la dinámica de aquellas.

**Tipología:** Estudio de casos, teóricos o prácticos, relacionados con la temática del Grado.

**Objetivos planteados:**

Una primera parte, el alumno llevará a cabo una búsqueda bibliográfica de los trabajos más relevantes de Karplus, Levitt y Warshel y de sus implicaciones en el campo de la química computacional.

En la segunda parte, el alumno instalará y aprenderá por si mismo, con unas indicaciones generadas del tutor, el manejo de programas de cálculo de dinámica molecular (NAMD) y de visualización de trayectorias de dinámica molecular (VMD). Posteriormente, el alumno llevará a cabo, usando estos programas, cálculos de dinámica molecular de diferentes proteínas de interés así como de un número de mutantes de las mismas.

**Bibliografía básica:**

Molecular dynamics simulations. Elementary methods, J.M. Hayle. Wiley and Sons, 1992.

**Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:**

Las tareas planteadas requieren un nivel físico-matemático comparativamente alto y conocimientos medios de informática, así como una formación adecuada en Química Física.

**Plazas:** 1

### **2. DATOS DEL TUTOR/A:**

**Nombre y apellidos:** JOSÉ MANUEL SÁNCHEZ RUIZ

**Ámbito de conocimiento/Departamento:** QUÍMICA FÍSICA

**Correo electrónico:** sanchezr@ugr.es

### **3. COTUTOR/A DE LA UGR (en su caso):**

**Nombre y apellidos:**

**Ámbito de conocimiento/Departamento:**

**Correo electrónico:**

**4. COTUTOR/A EXTERNO/A (en su caso):**

**Nombre y apellidos:**

**Correo electrónico:**

**Nombre de la empresa o institución:**

**Dirección postal:**

**Puesto del tutor en la empresa o institución:**

**Centro de convenio Externo:**

**5. DATOS DEL ESTUDIANTE:**

**Nombre y apellidos:**

**Correo electrónico:**