



MODELACIÓN NUMÉRICA DE UNA PROTEÍNA INSERTA EN UNA MEMBRANA CELULAR USANDO EL MÉTODO DE ELEMENTOS DE BORDE.

Nicolás Espinoza Muñoz

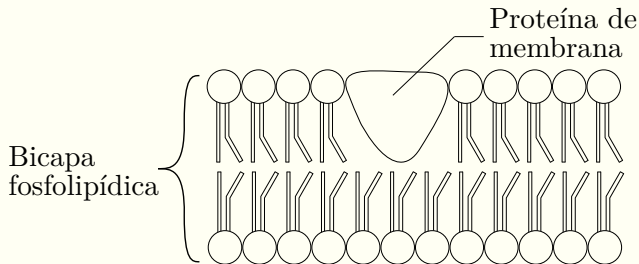
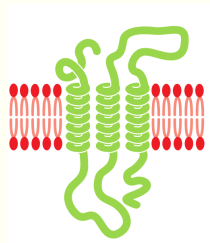
Profesor Guía:
Ph.D. Christopher Cooper V.

Profesor Correferente:
Ph.D. Harvey Zambrano R.

Motivación

La célula

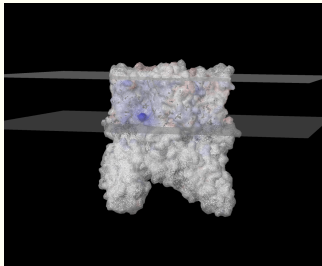
- La membrana se encuentra en todas las células.
- Se compone de una doble capa de fosfolípidos.
- Tiene proteínas insertas.



Representaciones

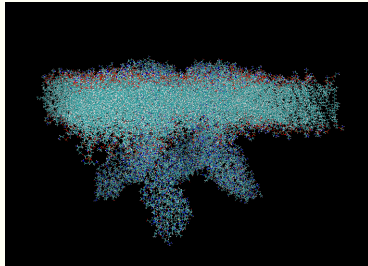
Solvente Implícito

Representación como continuo, con propiedades ponderadas.



Solvente Explícito

Representación de cada una de las moléculas componentes.

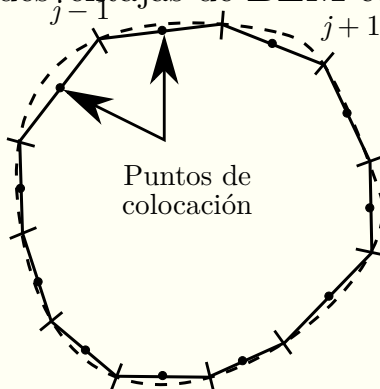


Métodos numéricos, análisis

Diferencias Finitas Elementos Finitos

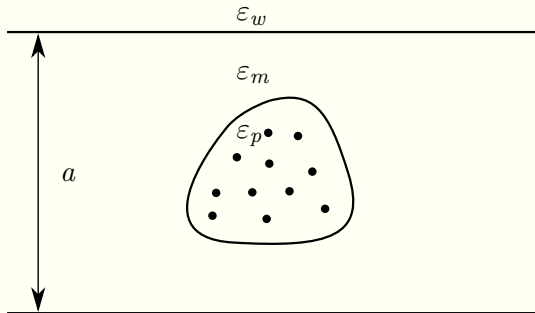
Boundary Element Method

Ventajas y desventajas de **BEM** como método



Objetivos del trabajo

- Ec. de Green con método de imágenes
- Cálculo de energías de solvatación
- Velocidad de cálculo rápida
- Implementación en programa



Teoría

Ley de Gauss

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = \frac{\rho}{\varepsilon}$$