



Análisis de Modos Normales en una Biomolécula

John Erick Cabrera Ramirez

Universidad Nacional de Colombia
Facultad de Ciencias, Departamento de Física
Bogotá, Colombia
2016

Análisis de de Modos Normales en una Biomolécula

John Erick Cabrera Ramirez

Tesis o trabajo de grado presentada(o) como requisito parcial para optar al título de:
Físico

Director(a):
PhD, ,Yuly Edith Sánchez Mendoza

Línea de Investigación:
Biofísica Molecular
Grupo de Investigación:
Biofísica Molecular

Universidad Nacional de Colombia
Facultad de Ciencias, Departamento de Física
Bogotá, Colombia
2016

(Dedicatoria o un lema)

Su uso es opcional y cada autor podrá determinar la distribución del texto en la página, se sugiere esta presentación. En ella el autor dedica su trabajo en forma especial a personas y/o entidades.

Por ejemplo:

A mis padres

o

La preocupación por el hombre y su destino siempre debe ser el interés primordial de todo esfuerzo técnico. Nunca olvides esto entre tus diagramas y ecuaciones.

Albert Einstein

Agradecimientos

Esta sección es opcional, en ella el autor agradece a las personas o instituciones que colaboraron en la realización de la tesis o trabajo de investigación. Si se incluye esta sección, deben aparecer los nombres completos, los cargos y su aporte al documento.

Resumen

El resumen es una presentación abreviada y precisa (la NTC 1486 de 2008 recomienda revisar la norma ISO 214 de 1976). Se debe usar una extensión máxima de 12 renglones. Se recomienda que este resumen sea analítico, es decir, que sea completo, con información cuantitativa y cualitativa, generalmente incluyendo los siguientes aspectos: objetivos, diseño, lugar y circunstancias, pacientes (u objetivo del estudio), intervención, mediciones y principales resultados, y conclusiones. Al final del resumen se deben usar palabras claves tomadas del texto (mínimo 3 y máximo 7 palabras), las cuales permiten la recuperación de la información.

Palabras clave: (máximo 10 palabras, preferiblemente seleccionadas de las listas internacionales que permitan el indizado cruzado).

A continuación se presentan algunos ejemplos de tesauros que se pueden consultar para asignar las palabras clave, según el área temática:

Artes: AAT: Art y Architecture Thesaurus.

Ciencias agropecuarias: 1) Agrovoc: Multilingual Agricultural Thesaurus - F.A.O. y 2) GEMET: General Multilingual Environmental Thesaurus.

Ciencias sociales y humanas: 1) Tesauro de la UNESCO y 2) Population Multilingual Thesaurus.

Ciencia y tecnología: 1) Astronomy Thesaurus Index. 2) Life Sciences Thesaurus, 3) Subject Vocabulary, Chemical Abstracts Service y 4) InterWATER: Tesauro de IRC - Centro Internacional de Agua Potable y Saneamiento.

Tecnologías y ciencias médicas: 1) MeSH: Medical Subject Headings (National Library of Medicine's USA) y 2) DECS: Descriptores en ciencias de la Salud (Biblioteca Regional de Medicina BIREME-OPS).

Multidisciplinarias: 1) LEMB - Listas de Encabezamientos de Materia y 2) LCSH- Library of Congress Subject Headings.

También se pueden encontrar listas de temas y palabras claves, consultando las distintas bases de datos disponibles a través del Portal del Sistema Nacional de Bibliotecas¹, en la sección Recursos bibliográficos. opción "Bases de datos".

Abstract

Es el mismo resumen pero traducido al inglés. Se debe usar una extensión máxima de 12 renglones. Al final del Abstract se deben traducir las anteriores palabras claves tomadas del

¹ver: www.sinab.unal.edu.co

texto (mínimo 3 y máximo 7 palabras), llamadas keywords. Es posible incluir el resumen en otro idioma diferente al español o al inglés, si se considera como importante dentro del tema tratado en la investigación, por ejemplo: un trabajo dedicado a problemas lingüísticos del mandarín seguramente estaría mejor con un resumen en mandarín.

Keywords: palabras clave en inglés(máximo 10 palabras, preferiblemente seleccionadas de las listas internacionales que permitan el indizado cruzado)

Contenido

Agradecimientos	VII
Resumen	IX
Lista de símbolos	XII
1. Modelos Teóricos	2
1.1. Subtítulos nivel 2	2
1.1.1. Subtítulos nivel 3	2
2. Capítulo 2	4
2.1. Ejemplos de citas bibliográficas	4
2.2. Ejemplos de presentación y citación de figuras	5
2.3. Ejemplo de presentación y citación de tablas y cuadros	5
2.3.1. Consideraciones adicionales para el manejo de figuras y tablas	7
3. Capítulo 3	8
4. Capítulo ...	9
5. Conclusiones y recomendaciones	10
5.1. Conclusiones	10
5.2. Recomendaciones	10
A. Anexo: Nombrar el anexo A de acuerdo con su contenido	11
B. Anexo: Nombrar el anexo B de acuerdo con su contenido	12
C. Anexo: Nombrar el anexo C de acuerdo con su contenido	13
Bibliografía	15

Lista de símbolos

Esta sección es opcional, dado que existen disciplinas que no manejan símbolos y/o abreviaturas.

Se incluyen símbolos generales (con letras latinas y griegas), subíndices, superíndices y abreviaturas (incluir sólo las clases de símbolos que se utilicen). Cada una de estas listas debe estar ubicada en orden alfabético de acuerdo con la primera letra del símbolo.

Símbolos con letras latinas

Símbolo	Término	Unidad SI	Definición
A	Área	m^2	$\int \int dx dy$
A_{BET}	Área interna del sólido	$\frac{\text{m}^2}{\text{g}}$	ver DIN ISO 9277
A_{g}	Área transversal de la fase gaseosa	m^2	Ec...
A_{s}	Área transversal de la carga a granel	m^2	Ec...
a	Coeficiente	1	Ec...
a	Contenido de ceniza	1	$\frac{m_{\text{ceniza}}}{m_{\text{bm},0}}$
c	Contenido de carbono	1	$\frac{m_{\text{C}}}{m}$
c	Longitud de la cuerda	m	Figura...
c	Concentración de la cantidad de materia	$\frac{\text{mol}}{\text{m}^3}$	$\frac{n}{V}$
D	Diámetro	m	
E_{A}	Energía de activación	$\frac{\text{kJ}}{\text{mol}}$	Ec....
F	Fracción de materia volátil	1	ver DIN 51720
Fr	Número de Froude	1	$\frac{\omega^2 R}{g_0}$
\vec{g}	Aceleración de la gravedad	$\frac{\text{m}}{\text{s}^2}$	$\frac{d^2 \vec{r}}{dt^2}$
H	Entalpía	J	$U + PV$

Símbolo	Término	Unidad SI	Definición
H_o	Poder calorífico superior	$\frac{\text{MJ}}{\text{kg}}$	ver DIN 51857
h	Contenido de hidrógeno	1	$\frac{m_H}{m}$
K	Coeficiente de equilibrio	1	Ec...
L	Longitud	m	DF
L	Longitud del reactor	m	Figura...
m	Masa	kg	DF
\dot{m}	Flujo de masa	$\frac{\text{kg}}{\text{s}}$	$\frac{m}{t}$
n	Velocidad de rotación	$\frac{1}{\text{s}}$	$\frac{\omega}{2\pi}$
n	Cantidad de materia	mol	DF
P	Presión	Pa	$\frac{\vec{F} \cdot \vec{n}}{A}$
Q	Calor	kJ	1. LT
T	Temperatura	K	DF
t	Tiempo	s	DF
x_i	Fracción de la cantidad de materia	1	$\frac{n_i}{n}$
V	Volumen	m^3	$\int dr^3$
\vec{u}	Velocidad	$\frac{\text{m}}{\text{s}}$	$(\frac{dr}{dt}, r \frac{dv}{dt}, \frac{dz}{dt})$
w_i	Fracción en masa del componente i	1	$\frac{m_i}{m_0}$
$w_{w,i}$	Contenido de humedad de la sustancia i	1	$\frac{m_{H_2O}}{m_{i,0}}$
Z	Factor de gases reales	1	$\frac{pv}{RT}$

Símbolos con letras griegas

Símbolo	Término	Unidad SI	Definición
α_{BET}	Factor de superficie	$\frac{\text{m}^2}{\text{g}}$	$(w_{\text{F,waf}})(A_{\text{BET}})$
β_i	Grado de formación del componente i	1	$\frac{m_i}{m_{\text{bm},0}}$
γ	Wandhaftreibwinkel (Stahlblech)	1	Sección...
ϵ	Porosidad de la partícula	1	$1 - \frac{\rho_s}{\rho_w}$
η	mittlere Bettneigungswinkel (Stürzen)	1	Figura...

Contenido

Símbolo	Término	Unidad SI	Definición
θ	Ángulo de inclinación de la cama	1	Figura...
θ_O	Ángulo superior de avalancha	1	Figura...
θ_U	Ángulo inferior de avalancha	1	Figura...
κ	Velocidad de calentamiento	$\frac{K}{s}$	$\frac{dT}{dt}$
ν	Coeficiente estequiométrico	1	ver DIN 13345
ρ_b	Densidad a granel	$\frac{kg}{m^3}$	$\frac{m_S}{V_S}$ (Sección...)
ρ_s	Densidad aparente	$\frac{kg}{m^3}$	$\frac{m_F}{V_P}$ (Sección...)
ρ_w	Densidad verdadera	$\frac{kg}{m^3}$	$\frac{m_F}{V_F}$ (Sección...)
τ	Tiempo adimensional	1	Ec....
Φ_V	Flujo volumétrico	$\frac{m^3}{s}$	$\frac{\Delta V}{\Delta t}$
ω	Velocidad angular	$\frac{1}{s}$	$\frac{dv}{dt}$

Subíndices

Subíndice	Término
bm	materia orgánica
DR	Dubinin-Radushkevich
E	Experimental
g	Fase gaseosa
k	Condensado
Ma	Macroporos
P	Partícula
p	Poros
p	Pirolizado
R	Reacción
t	Total
wf	Libre de agua
waf	Libre de agua y de ceniza
0	Estado de referencia

Superíndices

Superíndice	Término
n	Coefficiente x

Abreviaturas

Abreviatura	Término
1.LT	Primera ley de la termodinámica
DF	Dimensión fundamental
RFF	Racimos de fruta fresca

Introducción

El estudio de la dinámica en biomoléculas se puede estudiar mediante el análisis de sus modos normales NMA.

- **2 a 4 páginas**
- importancia
- origen (antecedentes teóricos y prácticos)
- objetivos
- alcances
- limitaciones
- metodología empleada
- significado del estudio en el avance del campo respectivo
- aplicación en el área investigada

Capítulo 1

Modelos Teóricos

La dinámica de una biomolécula se determina por las ecuaciones de movimiento de los átomos que la constituyen. Usualmente en una biomolécula el número de monómeros es mayor a 20, que al multiplicarlo por el número de átomos en cada monómero incrementa considerablemente el número de ecuaciones de movimiento a resolver, entonces se hace necesario realizar *dinámica molecular* (Molecular Dynamics por sus siglas en inglés MD) en la cual se estudia mediante simulaciones computacionales el movimiento de los átomos de acuerdo a las interacciones que presenten.

Las ecuaciones de movimiento se pueden conocer al aplicar los formalismos lagrangiano o hamiltoniano en los cuales es necesario conocer los potenciales con los que interactúan los átomos puede ser descrita mediante los métodos de la dinámica molecular o los análisis de modos normales (Normal Mode Analysis por sus siglas en inglés NMA). Los potenciales usados en [3, 9].

1.1. Subtítulos nivel 2

Toda división o capítulo, a su vez, puede subdividirse en otros niveles y sólo se enumera hasta el tercer nivel. Los títulos de segundo nivel se escriben con minúscula al margen izquierdo y sin punto final, están separados del texto o contenido por un interlineado posterior de 10 puntos y anterior de 20 puntos (tal y como se presenta en la plantilla).

1.1.1. Subtítulos nivel 3

De la cuarta subdivisión en adelante, cada nueva división o ítem puede ser señalada con viñetas, conservando el mismo estilo de ésta, a lo largo de todo el documento.

Las subdivisiones, las viñetas y sus textos acompañantes deben presentarse sin sangría y justificados.

1.1. Subtítulos nivel 2

- En caso que sea necesario utilizar viñetas, use este formato (viñetas cuadradas).

Capítulo 2

Capítulo 2

Existen varias normas para la citación bibliográfica. Algunas áreas del conocimiento prefieren normas específicas para citar las referencias bibliográficas en el texto y escribir la lista de bibliografía al final de los documentos. Esta plantilla brinda la libertad para que el autor de la tesis o trabajo de investigación utilice la norma bibliográfica común para su disciplina. Sin embargo, se solicita que la norma seleccionada se utilice con rigurosidad, sin olvidar referenciar "todos" los elementos tomados de otras fuentes (referencias bibliográficas, patentes consultadas, software empleado en el manuscrito, en el tratamiento a los datos y resultados del trabajo, consultas a personas (expertos o público general), entre otros).

2.1. Ejemplos de citaciones bibliográficas

Existen algunos ejemplos para la citación bibliográfica, por ejemplo, Microsoft Word (versiones posteriores al 2006), en el menú de referencias, se cuenta con la opción de insertar citas bibliográficas utilizando la norma APA (American Psychological Association) u otras normas y con la ayuda para construir automáticamente la lista al final del documento. De la misma manera, existen administradores bibliográficos compatibles con Microsoft Word como Zotero, End Note y el Reference Manager, disponibles a través del Sistema Nacional de Bibliotecas (SINAB) de la Universidad Nacional de Colombia¹ sección Recursos bibliográficos. opción "Herramientas Bibliográficas. A continuación se muestra un ejemplo de una de las formas más usadas para las citaciones bibliográficas.

Citación individual:[1].

Citación simultánea de varios autores: [11, 10, 12, ?, 8, 4, 6].

Por lo general, las referencias bibliográficas correspondientes a los anteriores números, se listan al final del documento en orden de aparición o en orden alfabético. Otras normas de citación incluyen el apellido del autor y el año de la referencia, por ejemplo: 1) "...énfasis en

¹Ver: www.sinab.unal.edu.co

2.2. Ejemplos de presentación y citación de figuras

elementos ligados al ámbito ingenieril que se enfocan en el manejo de datos e información estructurada y que según Kostoff (1997) ha atraído la atención de investigadores dado el advenimiento de TIC...”, 2) ”...Dicha afirmación coincide con los planteamientos de Snarch (1998), citado por Castellanos (2007), quien comenta que el manejo...z 3) ”...el futuro del sistema para argumentar los procesos de toma de decisiones y el desarrollo de ideas innovadoras (Nosella *et al.*, 2008)...”.

2.2. Ejemplos de presentación y citación de figuras

Las ilustraciones forman parte del contenido de los capítulos. Se deben colocar en la misma página en que se mencionan o en la siguiente (deben siempre mencionarse en el texto).

Las llamadas para explicar algún aspecto de la información deben hacerse con nota al pie y su nota correspondiente². La fuente documental se debe escribir al final de la ilustración o figura con los elementos de la referencia (de acuerdo con las normas seleccionadas) y no como pie de página. Un ejemplo para la presentación y citación de figuras, se presenta a continuación (citación directa):

Por medio de las propiedades del fruto, según el espesor del endocarpio, se hace una clasificación de la palma de aceite en tres tipos: Dura, Ternera y Pisifera, que se ilustran en la Figura 2-1.

2.3. Ejemplo de presentación y citación de tablas y cuadros

Para la edición de tablas, cada columna debe llevar su título; la primera palabra se debe escribir con mayúscula inicial y preferiblemente sin abreviaturas. En las tablas y cuadros, los títulos y datos se deben ubicar entre líneas horizontales y verticales cerradas (como se realiza en esta plantilla).

La numeración de las tablas se realiza de la misma manera que las figuras o ilustraciones, a lo largo de todo el texto. Deben llevar un título breve, que concreta el contenido de la tabla; éste se debe escribir en la parte superior de la misma. Para la presentación de cuadros, se

²Las notas van como ”notas al pie”. Se utilizan para explicar, comentar o hacer referencia al texto de un documento, así como para introducir comentarios detallados y en ocasiones para citar fuentes de información (aunque para esta opción es mejor seguir en detalle las normas de citación bibliográfica seleccionadas).

2. Capítulo 2

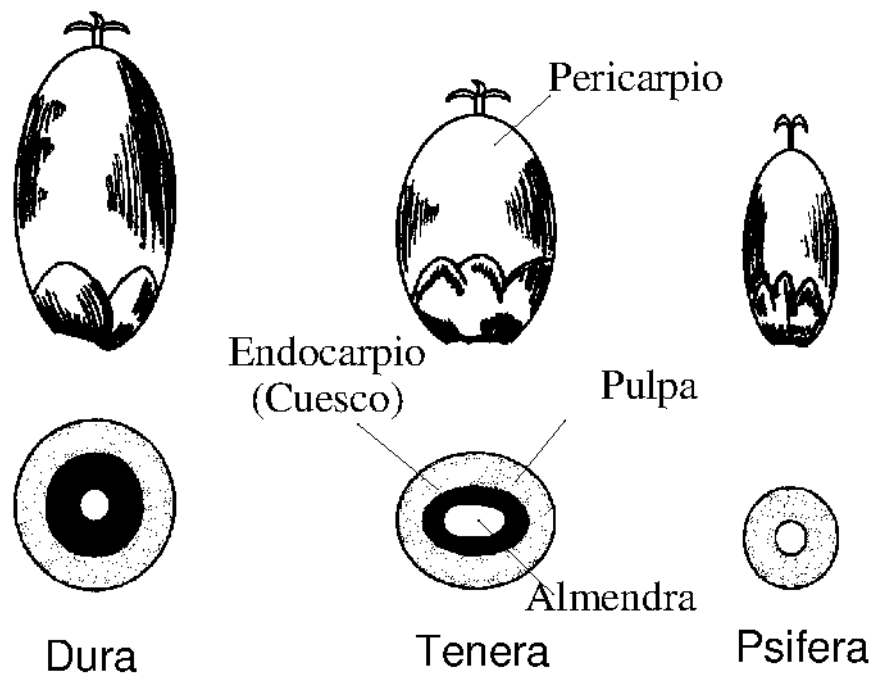


Figura 2-1.: Tipos y partes del fruto de palma de aceite [2, 5].

deben seguir las indicaciones dadas para las tablas.

Un ejemplo para la presentación y citación de tablas (citación indirecta), se presenta a continuación:

De esta participación aproximadamente el 60 % proviene de biomasa (Tabla 2-1).

Tabla 2-1.: Participación de las energías renovables en el suministro total de energía primaria [7].

Region	Participación en el suministro de energía primaria / % (Mtoe) ¹	
	Energías renovables	Participación de la biomasa
Latinoamérica	28,9 (140)	62,4 (87,4)
Colombia	27,7 (7,6)	54,4 (4,1)
Alemania	3,8 (13,2)	65,8 (8,7)
Mundial	13,1 (1404,0)	79,4 (1114,8)

¹ 1 kg oe=10000 kcal=41,868 MJ

NOTA: en el caso en que el contenido de la tabla o cuadro sea muy extenso, se puede cambiar

2.3. Ejemplo de presentación y citación de tablas y cuadros

el tamaño de la letra, siempre y cuando ésta sea visible por el lector.

2.3.1. Consideraciones adicionales para el manejo de figuras y tablas

Cuando una tabla, cuadro o figura ocupa más de una página, se debe repetir su identificación numérica, seguida por la palabra continuación.

Adicionalmente los encabezados de las columnas se deben repetir en todas las páginas después de la primera.

Los anteriores lineamientos se contemplan en la presente plantilla.

- **Presentación y citación de ecuaciones.**

La citación de ecuaciones, en caso que se presenten, debe hacerse como lo sugiere esta plantilla. Todas las ecuaciones deben estar numeradas y citadas dentro del texto.

Para el manejo de cifras se debe seleccionar la norma según el área de conocimiento de la tesis o trabajo de investigación.

Capítulo 3

Capítulo 3

Se deben incluir tantos capítulos como se requieran; sin embargo, se recomienda que la tesis o trabajo de investigación tenga un mínimo 3 capítulos y máximo de 6 capítulos (incluyendo las conclusiones).

Capítulo 4

Capítulo ...

Se deben incluir tantos capítulos como se requieran; sin embargo, se recomienda que la tesis o trabajo de investigación tenga un mínimo 3 capítulos y máximo de 6 capítulos (incluyendo las conclusiones).

Conclusiones y recomendaciones

5.1. Conclusiones

Las conclusiones constituyen un capítulo independiente y presentan, en forma lógica, los resultados de la tesis o trabajo de investigación. Las conclusiones deben ser la respuesta a los objetivos o propósitos planteados. Se deben titular con la palabra conclusiones en el mismo formato de los títulos de los capítulos anteriores (Títulos primer nivel), precedida por el numeral correspondiente (según la presente plantilla).

5.2. Recomendaciones

Se presentan como una serie de aspectos que se podrían realizar en un futuro para emprender investigaciones similares o fortalecer la investigación realizada. Deben contemplar las perspectivas de la investigación, las cuales son sugerencias, proyecciones o alternativas que se presentan para modificar, cambiar o incidir sobre una situación específica o una problemática encontrada. Pueden presentarse como un texto con características argumentativas, resultado de una reflexión acerca de la tesis o trabajo de investigación.

Apéndice A

Anexo: Nombrar el anexo A de acuerdo con su contenido

Los Anexos son documentos o elementos que complementan el cuerpo de la tesis o trabajo de investigación y que se relacionan, directa o indirectamente, con la investigación, tales como acetatos, cd, normas, etc.

Anexo: Nombrar el anexo B de acuerdo con su contenido

A final del documento es opcional incluir índices o glosarios. Éstos son listas detalladas y especializadas de los términos, nombres, autores, temas, etc., que aparecen en el mismo. Sirven para facilitar su localización en el texto. Los índices pueden ser alfabéticos, cronológicos, numéricos, analíticos, entre otros. Luego de cada palabra, término, etc., se pone coma y el número de la página donde aparece esta información.

Apéndice C

Anexo: Nombrar el anexo C de acuerdo con su contenido

MANEJO DE LA BIBLIOGRAFÍA: la bibliografía es la relación de las fuentes documentales consultadas por el investigador para sustentar sus trabajos. Su inclusión es obligatoria en todo trabajo de investigación. Cada referencia bibliográfica se inicia contra el margen izquierdo.

La NTC 5613 establece los requisitos para la presentación de referencias bibliográficas citas y notas de pie de página. Sin embargo, se tiene la libertad de usar cualquier norma bibliográfica de acuerdo con lo acostumbrado por cada disciplina del conocimiento. En esta medida es necesario que la norma seleccionada se aplique con rigurosidad.

Es necesario tener en cuenta que la norma ISO 690:1987 (en España, UNE 50-104-94) es el marco internacional que da las pautas mínimas para las citas bibliográficas de documentos impresos y publicados. A continuación se lista algunas instituciones que brindan parámetros para el manejo de las referencias bibliográficas:

C. Anexo: Nombrar el anexo C de acuerdo con su contenido

Institución	Disciplina de aplicación
Modern Language Association (MLA)	Literatura, artes y humanidades
American Psychological Association (APA)	Ambito de la salud (psicología, medicina) y en general en todas las ciencias sociales
Universidad de Chicago/Turabian	Periodismo, historia y humanidades.
AMA (Asociación Médica de los Estados Unidos)	Ambito de la salud (psicología, medicina)
Vancouver	Todas las disciplinas
Council of Science Editors (CSE)	En la actualidad abarca diversas ciencias
National Library of Medicine (NLM) (Biblioteca Nacional de Medicina)	En el ámbito médico y, por extensión, en ciencias.
Harvard System of Referencing Guide	Todas las disciplinas
JabRef y KBibTeX	Todas las disciplinas

Para incluir las referencias dentro del texto y realizar lista de la bibliografía en la respectiva sección, puede utilizar las herramientas que Latex suministra o, revisar el instructivo desarrollado por el Sistema de Bibliotecas de la Universidad Nacional de Colombia¹, disponible en la sección "Servicios", opción "Trámites enlace .^{Entrega de tesis}".

¹Ver: www.sinab.unal.edu.co

Bibliografía

- [1] ANTAL, M.J.J.: Biomass Pyrolysis: A Review of the Literature Part 1 - Carbohydrate Pyrolysis. En: *Advances in Solar Energy Vol. 1 American Solar Energy Society*, 1982, p. 61–111
- [2] FRANKE, G.: *Nutzpflanzen der Tropen und Subtropen*. Stuttgart : UTB, 1994
- [3] GOLDSTEIN, H. ; C., Poole ; SAFKO, J.: *Classical Mechanics*. col : Addison Wesley, 2002
- [4] GÓMEZ, Adriana: *Investigación del Proceso de Gasificación de Biomasa en un Gasificador en Paralelo*, Universidad Nacional de Colombia, Tesis de Grado, 2002
- [5] HARTLEY, C.W.S.: *The Oil Palm*. London : Longman, 1977
- [6] INTERNATIONAL ENERGY AGENCY, IEA. *Needs for Renewables 2001: Developing a New Generation of Sustainable Energy Technologies*. 2001
- [7] INTERNATIONAL ENERGY AGENCY, IEA. *Renewables in Global Energy Supply*. 2007
- [8] MARSH, H. (Ed.) ; E.A., Heintz (Ed.) ; RODRIGUEZ-REINOSO, F. (Ed.): *jajajaja*. Alicante : Universidad de Alicante, 1997
- [9] MSH, H. (Ed.) ; E.A., Heintz (Ed.) ; RODRIGUEZ-REINOSO, F. (Ed.): *Technologies*. Alicante : Universidad de Alicante, 1999
- [10] RINCÓN, S.L.: Herstellung von Aktivkohle aus Biogenen Reststoffen zum Einsatz in der Rauchgasreinigung / Institut für Thermische Energietechnik, Universität Kassel. 1999. – Informe de Investigación. – 38 p.
- [11] THURNER, F. ; MANN, U.: Kinetic Investigation of Wood Pyrolysis. En: *Ind. Eng. Chem. Res.* 20 (1981), p. 482–488
- [12] WIEST, W.: *Zur Pyrolyse von Biomasse im Drehrohrreaktor*. Kassel, Universität Gesamthochschule Kassel, Tesis de Doctorado, 1998