

UNIVERSIDAD ANDRÉS BELLO

Facultad de Cs Biológicas

Ing. En Bioinformática

**Informe 01: Simulaciones moleculares de sistemas líquidos**

Autor:   
Néstor Palominos González

Profesor:

Daniel Aguayo

Santiago de Chile, 2017

Contenido

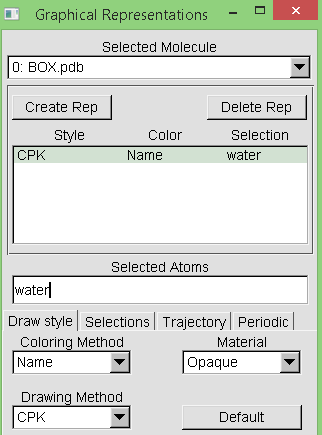
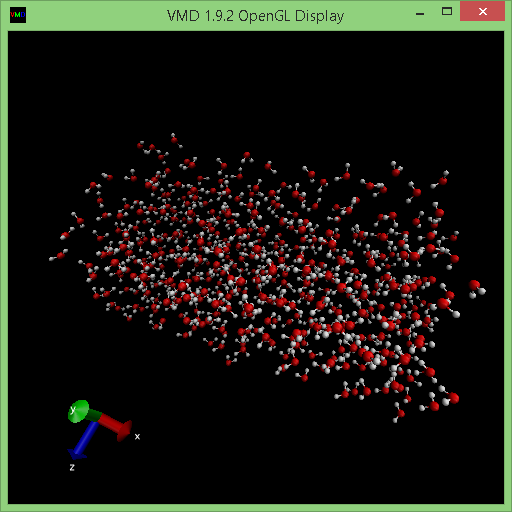
[Instalación de Modeller 3](#_Toc494848838)

[Operación de Modeller 4](#_Toc494848839)

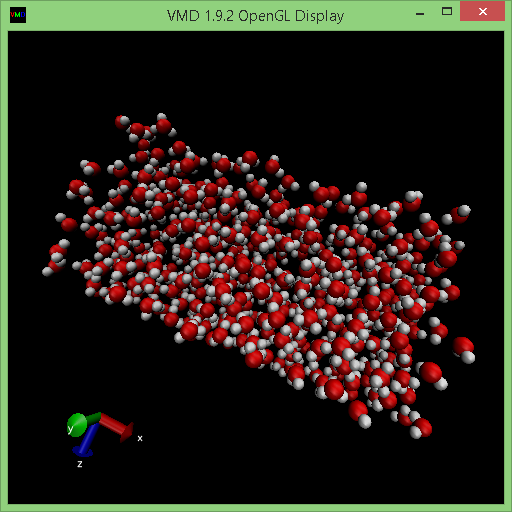
[Construccion del modelo 7](#_Toc494848840)

[Evaluación del modelo 8](#_Toc494848841)

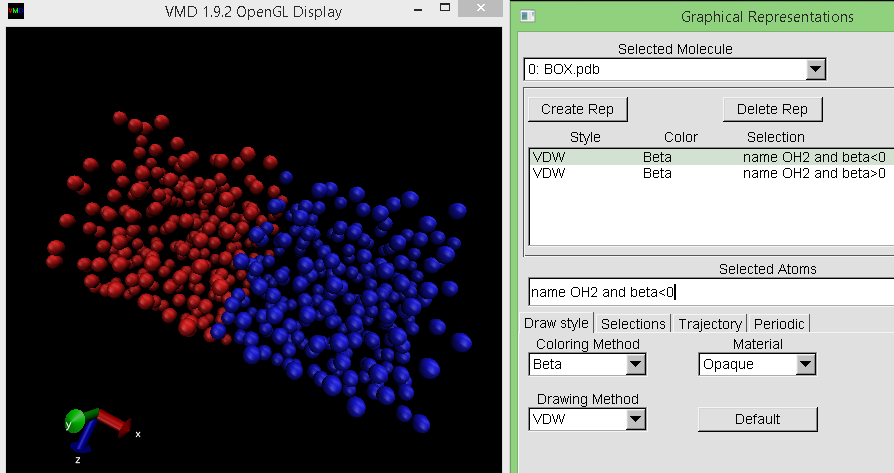
# Introduccion a VMD



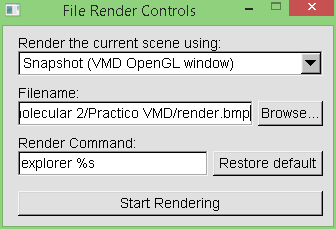
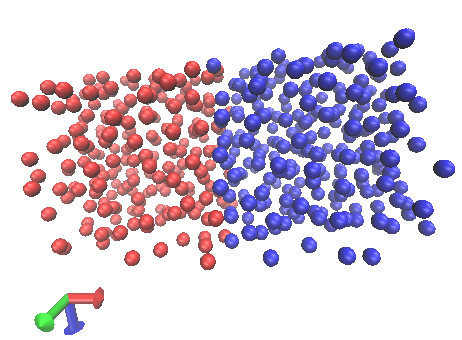
9. VDW



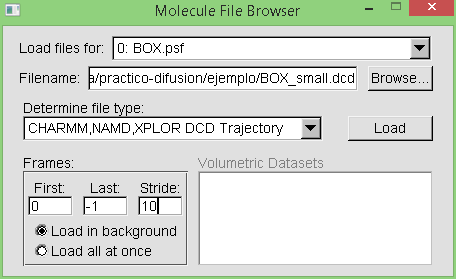
11. Representación beta>0 y beta<0



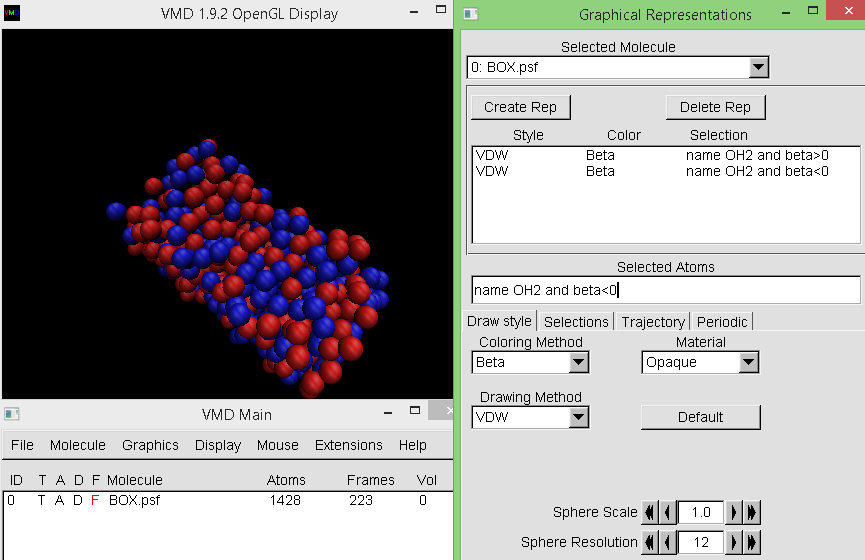
15. Generación de imagen

26. stride 10



27.



29. el archivo de trayectorias muestra una animación del sistema de aguas en el tiempo

# Análisis de la estructura molecular del agua

**A. Que sucede con las moléculas de agua que se encuentran adyacentes a la molécula seleccionada?**

Algunas forman puentes de hidrogeno

**B. A que distancia se encuentran las moléculas de agua que forman enlaces de hidrogeno? Adoptan alguna configuración tridimensional entre ellas?**

**C. Documente sus respuestas utilizando imágenes obtenidas**

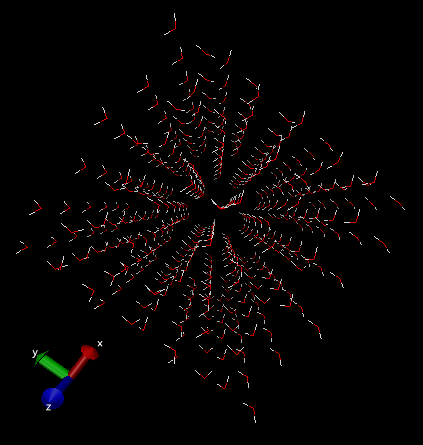
# Función de distribución radial

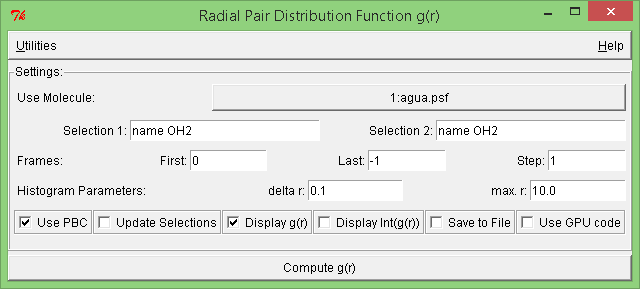
**D?**

**E?**

**F. Determine y compare g(r) para la simulación a 10K y 300K**

10K





**G. Explique la naturaleza del pico observado a 1.8A en la pdf del agua a 300K**

**H. Que puede inferir del efecto de la temperatura sobre la estructura del agua a partir del análisis de g(r) de las simulaciones realizadas**