



Computo de sistemas complejos: Una revisión al Software.

Rodolfo Espíndola Heredia¹, Damian Muciño Cruz¹ y Pedro Jesús Díaz Tecanhuey¹

¹ Universidad Autónoma Metropolitana-Azcapotzalco. rodolfoespiher@yahoo.com.mx

Las simulaciones moleculares son recurridas en el ámbito de la mecánica estadística, debido a que se busca obtener las propiedades macroscópicas, a partir del comportamiento microscópico colectivo de las moléculas que conforman un sistema, el cual está determinado principalmente por 1) la estructura de la molécula, 2) con la forma de interacción molecular. Desde que las computadoras se volvieron accesibles, un gran número de sistemas termodinámicos fueron simulados para distintos colectivos, tales como: NVT, NPT, mVT, entre otros. El avance en la tecnología y las comunicaciones ha permitido que se desarrollen diferentes plataformas que permitan simular sistemas mucho más complejos, al día de hoy se logran simular sistemas de cadenas de monómeros y estructuras moleculares complejas como algunas proteínas. En el presente trabajo hacemos una revisión del software que consideramos importantes ya que son los más recurridos y utilizados actualmente para realizar simulaciones moleculares, tales como: *GROMACS*, que desarrolla principalmente dinámicas moleculares, *NAMD* que utiliza la comunicación entre varias computadoras para simular en paralelo, *AMBER* que permite realizar simulaciones de Biomoléculas, entre otros. La revisión permite conocer sus ventajas y desventajas y asimismo presentamos las virtudes que el desarrollo de este campo ha presentado para los que se quieran dedicar a la mecánica estadística de sistemas simples como complejos.