



DEPARTAMENTO DE
MATEMÁTICA APLICADA



Seminario de Matemática Aplicada

Antonio Rey Gayo

Departamento de Química Física I, UCM

“Modelización en Química: Aspectos termodinámicos del plegamiento de proteínas mediante métodos de Monte Carlo en modelos simples ”

Con frecuencia, diferentes áreas de conocimiento utilizamos terminología parecida para referirnos a conceptos aparentemente muy diferentes. En este seminario, se presenta un modelo de simulación sencillo para estudiar un sistema tan complejo como las proteínas de los seres vivos, y sobre todo los aspectos relacionados con la estabilidad de su estructura y su proceso de plegamiento.

La modelización desde el punto de vista de la Química tiene evidentemente un fundamento matemático riguroso, y también en este caso termoestadístico, pero es bastante diferente a la modelización matemática de sistemas complejos más frecuente en la Facultad de CC. Matemáticas. A lo largo del seminario se describirá la justificación de un modelo “*coarse-grained*” para la representación de la cadena proteica, el método de Monte Carlo para realizar un muestreo significativo de su espacio de configuraciones, y la obtención de propiedades termodinámicas y estructurales del sistema mediante un complejo análisis numérico de los resultados de la simulación.

Organizado por el Departamento de Matemática Aplicada de la UCM, el Grupo MOMAT y el IMI.

**Fecha: Martes 9 de marzo, a las 12.00 horas
Seminario Alberto Dou (aula 209)
Facultad de CC Matemáticas, UCM.**