

Título: Campo de fuerza en Simulaciones Moleculares, limitaciones, aplicaciones y perspectivas en diversas áreas del conocimiento.

Resumen: Las propiedades físicas de cualquier sistema molecular dependen de la interacción de los átomos y moléculas que conforman dichos sistemas. Estas interacciones se pueden dividir en dos grandes grupos, intramoleculares e intermoleculares. Las primeras son las que describen la contribución energética debida a los átomos que conforman una molécula, es decir, los enlaces, los ángulos de enlace y las torsiones. Las interacciones intermoleculares describen la forma en que átomos de distintas moléculas interactúan y son descritas por potenciales del tipo Lennard-Jones y por el potencial electrostático.

En el campo de las simulaciones moleculares, el campo de fuerza es una parte esencial. Es una función matemática que incluye todas las contribuciones energéticas de las interacciones ya mencionadas, también, el campo de fuerza es el conjunto de parámetros necesarios en la función mencionada (constantes de potenciales armónicos, funciones cosenoidales, distancias, ángulos de equilibrio, etc.).

El entendimiento del campo de fuerza y su desarrollo han permitido describir, con algunas limitaciones, de forma correcta el comportamiento físico de los sistemas y, por tanto, darle un carácter predictivo a las simulaciones moleculares.