TUTORIAL sobre SIMULACIÓN MOLECULAR:

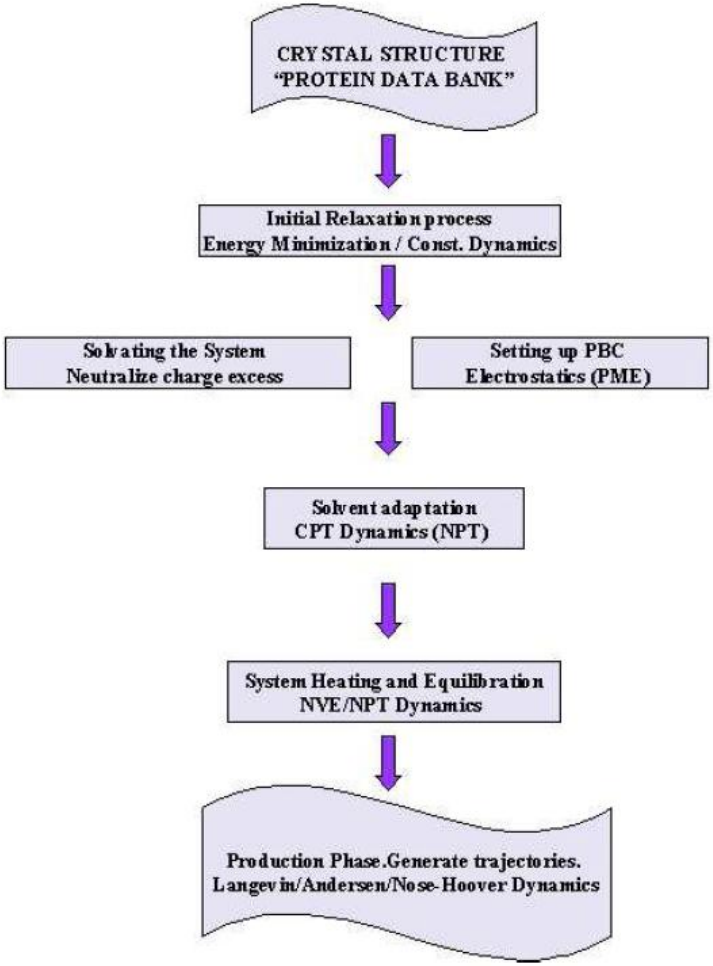
- VISUALIZADORES DE ESTRUCTURAS:

1) RASMOL: http://www.umass.edu/microbio/rasmol/
2) VMD: http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/
3) Swiss PDB-viewer: http://spdbv.vital-it.ch/
4) PyMol: http://www.pymol.org/

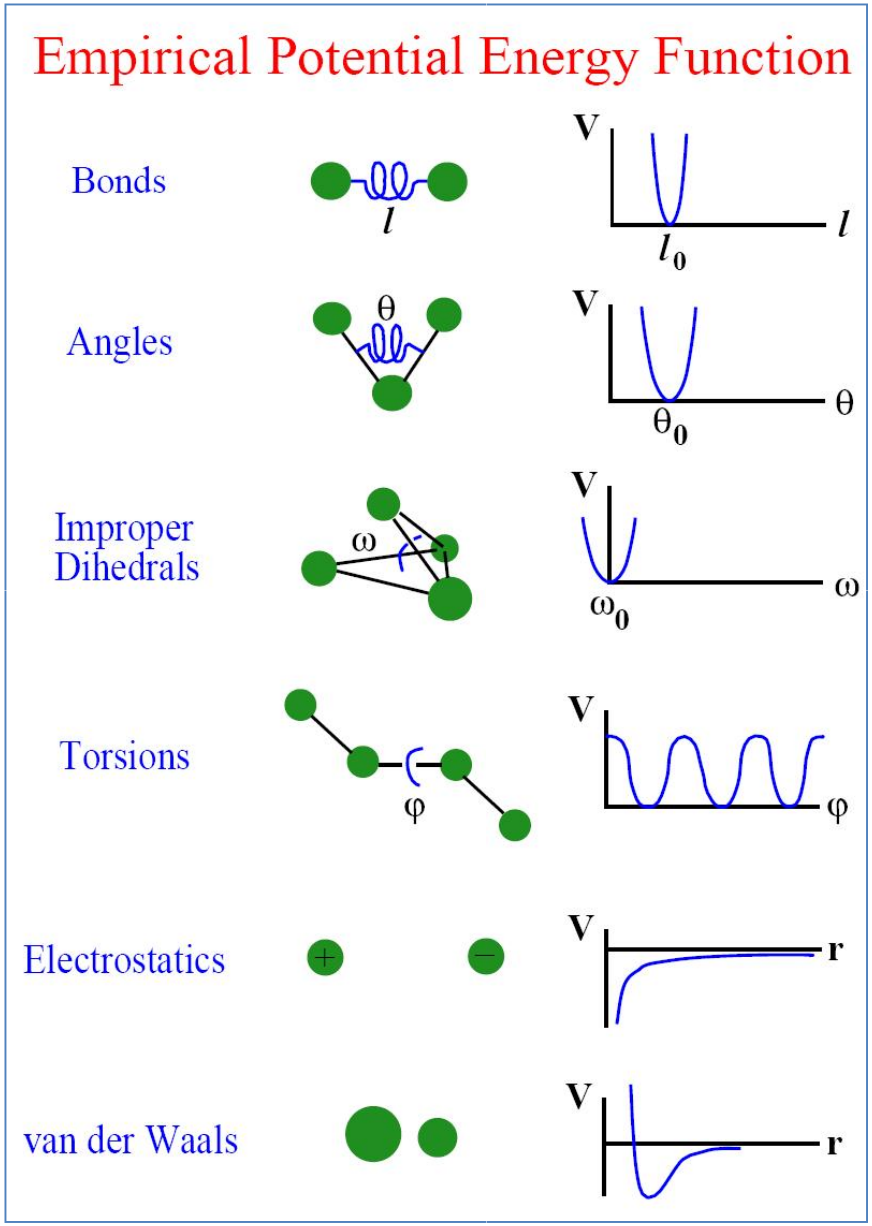
- PROGRAMAS DE SIMULACIÓN:

1) CHARMM: http://www.charmm.org/
2) Tutorial CHARMM: http://www.ch.embnet.org/MD_tutorial/
3) NAMD: http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/
4) GROMACS: http://www.gromacs.org/
5) AMBER: http://ambermd.org/

Estructura de una simulación.



Empirical Potential Energy Function



Estructura de ficheros en CHARMM (CHARMm o Insight II)