



CURSO TEÓRICO-PRÁCTICO

Descripción molecular del comportamiento de la materia.

Inscripciones al correo: omarxv@live.com.mx

Objetivos: Que los participantes conozcan las herramientas para desarrollar experimentos computacionales en los distintos estados físicos de la materia.

Requisitos:

- Sólo conocimientos básicos de química y física general.
- Tendrán Prioridad los alumnos de la licenciatura en Química, de haber cupo, se aceptarán a los interesados de otras áreas.
- **Cupo limitado a 20 participantes**

DIA 1.

Teoría: Interacciones moleculares de átomos enlazados y no enlazados:

+ distancias, ángulos de enlace y ángulos de torsión

+ electrostáticas, por inducción, de dispersión, de van der Waals y de puentes de hidrógeno.

Ejercicios: Obtener parámetros del potencial de interacción usando Gaussian

Profesor: Dr. Humberto Saint-Martin

DIA 2.

Teoría: Describir la trayectoria de las moléculas sujetas a condiciones de temperatura y presión.

Ejercicios: Propiedades físicas del agua (densidad, puentes de hidrógeno, número de coordinación, coexistencia entre fases)

Profesor: Dr. José Alejandre

DIA 3.

Ejercicios: Propiedades físicas de sistemas iónicos: sales inorgánicas y orgánicas.

Profesor: Dra. Arlette Méndez

DIA 4.

Ejercicio: Nociones del diseño racional de fármacos con métodos computacionales

Profesor: Dr. Edgar Núñez

NOTA: Los ejercicios se harán en salones con computadoras usando los programas Gaussian y GROMACS