



# Taller 2024

## Simulación molecular de líquidos y materiales

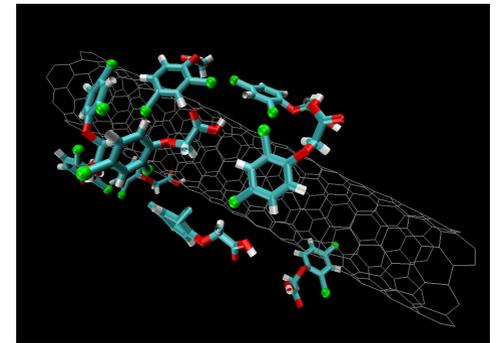
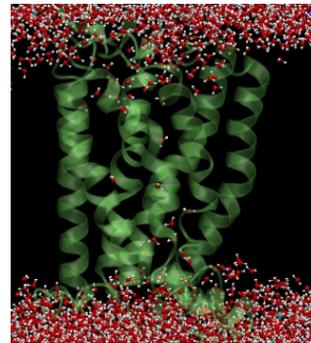
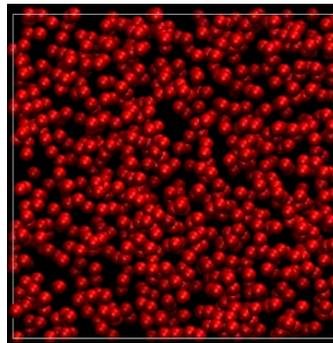
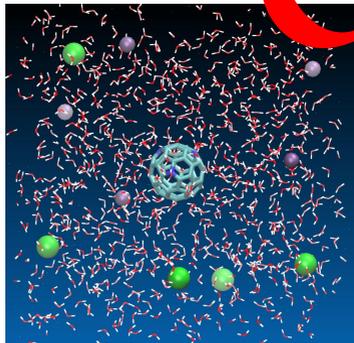
17 al 20 de junio de 2024

Instituto de Física "Ing. Luis Rivera Terrazas", BUAP

Información adicional: <http://www.ifuap.buap.mx/eventos/eventos.php>

Inscripciones: Dra. Minerva González Melchor, Correo: [minerva@ifuap.buap.mx](mailto:minerva@ifuap.buap.mx)

**CUPPLENNO**



# TALLER 2024

## SIMULACIÓN MOLECULAR DE LÍQUIDOS Y MATERIALES

Instituto de Física “Ing. Luis Rivera Terrazas”  
CA Física Computacional de la Materia Condensada

17 al 20 de junio de 2024

Dirigido a estudiantes de licenciatura y posgrado en las áreas de Física, Ciencia de Materiales, Ingenierías y áreas afines. Se abordará el uso y aplicación de simulación molecular a diferentes sistemas y el cálculo de las propiedades relevantes en su descripción (agua, electrolitos y proteínas, entre otros).

### Programa

Lugar: Sala de Juntas del IFUAP, Edificio IF3 de la Biblioteca

Instructores

**Dra. Minerva González Melchor**

**Dr. Jorge Alberto Aguilar Pineda**

**Marco Antonio Aguilar Cárcamo**

**Pablo Pomares Valdés**

Lunes 17 de junio de 2024	9:00 – 9:10	Bienvenida
	9:20 – 11:30	Sesión 1-A
	11:30 – 12:00	Receso
	12:00 – 14:00	Sesión 1-B
Martes 18 de junio de 2024	9:00 – 11:00	Sesión 2-A
	11:00 – 11:30	Receso
	11:30 – 14:00	Sesión 2-B
Miércoles 19 de junio de 2024	9:00 – 11:30	Sesión 3-A
	11:30 – 12:00	Receso
	12:00 – 14:00	Sesión 3-B
Jueves 20 de junio de 2024	9:00 – 10:30	Sesión 4-A
	10:30 – 11:00	Receso
	11:00 – 12:30	Sesión 4-B
	12:30 – 14:00	Sesión 4-C
	14:00	Clausura

# TALLER

## SIMULACIÓN MOLECULAR DE LÍQUIDOS Y MATERIALES

Informes e Inscripciones

Dra. Minerva González Melchor, IFUAP, Tel. 229 5500, Ext. 2016

E-mail: [minerva@ifuap.buap.mx](mailto:minerva@ifuap.buap.mx)

Para la inscripción enviar: Nombre, correo institucional (y/o alternativo), procedencia, nivel de estudios

Conocimientos de las siguientes áreas son útiles:

Mecánica Clásica, Mecánica Cuántica, Mecánica Estadística, Química.

Los siguientes son requisitos para desarrollar las actividades del taller

- Laptop con sistema operativo Linux actualizado
- Visualizador VMD instalado <https://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>
- Programa GROMACS instalado <https://www.gromacs.org/>
- Graficador Grace/Xmgrace <https://plasma-gate.weizmann.ac.il/Grace/>
- Programa Chimera UCSF <https://www.cgl.ucsf.edu/chimera/>
- Compilador gfortran y navegador firefox actualizados
- Una sesión requiere anaconda 24.1.3

A los inscritos se les proporcionará información de apoyo en la instalación de los programas.