

TALLER DE SIMULACIÓN MOLECULAR

Del 9 al 11 de Diciembre de 2013

**Todas las actividades se realizarán en la Unidad de Seminarios, BUAP
Ciudad Universitaria, Col. San Manuel**

Hora	Lunes 9	Martes 10	Miércoles 11
9:00 – 11:00	Introducción a linux	Interacciones moleculares y campos de fuerza	Gromacs: Propiedades termodinámicas, de transporte y de estructura
11:00 – 13:00	Fundamentos y aplicaciones de Mecánica Cuántica	Programa Gromacs y aplicación a Lennard-Jones	Presentación de proyectos por los participantes
13:00 – 15:00	COMIDA	COMIDA	COMIDA
15:00 – 17:00	Fundamentos y aplicaciones de de Mecánica Estadística	Programa Gromacs y aplicación para el agua	
17:00 – 19:00	Introducción a Dinámica Molecular (Colectivos NVE, NVT y NPT)	Programa Gromacs y aplicación para líquidos iónicos a temperatura ambiente	
	Formación de equipos de trabajo Proyecto 1: Equilibrio líquido-vapor de Lennard-Jones	Proyecto 1: Simulaciones para obtener máximo en densidad del agua Proyecto 2: Ecuación de estado del agua a altas presiones Proyecto 3. Transiciones de fase con LJ usando NPT	