

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 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 | |