

Dinámica Molecular sobre PES Cuántica

Hora	Lunes 25	Martes 26	Miércoles 27	Jueves 28	Viernes 29
9:00 a 11:00	Cálculos de Estructura Electrónica (WFT) Dr. Ramón Hernández Lamonedá, CIQ – UAEMor.	Métodos híbridos: desde PCM hasta QM/MM Dr. Humberto Saint Martin Posada, ICF – UNAM	QTAIM Dr. Raymundo Hernández Esparza, DQ – CBI – UAM – I	QM/MM con NWChem Dr. Humberto Saint Martin Posada, ICF – UNAM	Avogadro Dr. César Millán Pacheco, FF – UAEMor.
11:00 a 11:30	Colación y bebidas	Colación y bebidas	Colación y bebidas	Colación y bebidas	Colación y bebidas
11:30 a 13:30	Cálculos de Densidad Electrónica (DFT) Dr. Remigio Cabrera Trujillo, ICF – UNAM	Cálculos con PCM y SMD Dr. Humberto Saint Martin Posada, ICF – UNAM	QTAIM Dr. Raymundo Hernández Esparza, DQ – CBI – UAM – I	QM/MM con NWChem Dr. Humberto Saint Martin Posada, ICF – UNAM	Emprendedurismo L. en N. Blanca Saint Martin Posada Emprendedora independiente
13:30 a 15:00	Comida	Comida	Comida	Comida	Madrigal (pámpano)
15:00 a 17:00	Dinámica Molecular con orbitales atómicos Dr. César Iván León Pimentel, FQ – UNAM	Cálculos con DFT Dr. Remigio Cabrera Trujillo, ICF – UNAM	Molden Dr. Humberto Saint Martin Posada, ICF – UNAM	BOMD-DFT con NWChem Dr. César Iván León Pimentel, FQ – UNAM	
17:00 a 19:00					