

**PROGRAMA PARA EL 7º TALLER DE DINÁMICA MOLECULAR**  
Cuernavaca, Morelos, del 31 de Julio al 4 de Agosto de 2016

**Grupo Principiantes**

Hora	Lunes 31	Martes 1	Miércoles 2	Jueves 3	Viernes 4
9:00 a 9:30	Inauguración	Presentaciones de participantes			
9:30 a 11:30	Linux	Dinámica Molecular	GROMACS	Método de Monte Carlo	LAMMPS
11:30 a 12:00	Ruptura café				
12:00 a 14:00	Introducción a Cálculos Cuánticos	NAMD	GROMACS	DL_POLY	LAMMPS
14:00 a 15:30	Comida				
15:30 a 17:30	Mecánica Estadística	NAMD	NWCHEM	DL_POLY	
17:30 a 18:00	Ruptura café				
18:00 a 19:00	Introducción a Docking	Charla 1	Charla 2	Charla 3	

**Grupo Intermedio**

Hora	Lunes 31	Martes 1	Miércoles 2	Jueves 3	Viernes 4
9:00 a 9:30	Inauguración	Presentaciones de participantes			
9:30 a 11:30	Dinámica Molecular	Método de Monte Carlo	Cálculos Cuánticos	NWCHEM	GROMACS
11:30 a 12:00	Ruptura café				
12:00 a 14:00	DL_POLY	MCCCS Towhee	NAMD	LAMMPS	GROMACS
14:00 a 15:30	Comida				
15:30 a 17:30	DL_POLY	MCCCS Towhee	NAMD	LAMMPS	
17:30 a 18:00	Ruptura café				
18:00 a 19:00	Introducción a Docking	Charla 1	Charla 2	Charla 3	

### Grupo Avanzado (Aplicaciones selectas)

Hora	Lunes 31	Martes 1	Miércoles 2	Jueves 3	Viernes 4
9:00 a 9:30	Inauguración	Presentaciones de participantes			
9:30 a 11:30	Método de Monte Carlo	QM/MM LICHEM	Equilibrios entre fases	Interacciones proteína-ligando	Cálculos de Energía Libre
11:30 a 12:00	Ruptura café				
12:00 a 14:00	MCCCS Towhee	QM/MM LICHEM	Equilibrios entre fases	Docking	Cálculos de Energía Libre
14:00 a 15:30	Comida				
15:30 a 17:30	MCCCS Towhee	Modelos de Grano Grueso	Interfaces	Docking	
17:30 a 18:00	Ruptura café				
18:00 a 19:00	Modelos de Grano Grueso	Charla 1	Charla 2	Charla 3	

### Grupo Armador de DM

Hora	Lunes 31	Martes 1	Miércoles 2	Jueves 3	Viernes 4
9:00 a 9:30	Inauguración	Presentaciones de participantes			
9:30 a 11:30	Arma DM	Arma DM	Arma DM	Arma DM	Arma DM
11:30 a 12:00	Ruptura café				
12:00 a 14:00	Arma DM	Arma DM	Arma DM	Arma DM	Arma DM
14:00 a 15:30	Comida				
15:30 a 17:30	Arma DM	Arma DM	Arma DM	Arma DM	
17:30 a 18:00	Ruptura café				
18:00 a 19:00	Introducción a Docking	Charla 1	Charla 2	Charla 3	