

**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	

### **Charlas:**

1. María Guadalupe Villegas González de la Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Estudio de Dinámica Molecular para determinar la solubilidad en diferentes solventes para el fármaco LASSBio 294
2. José María Zamora Fuentes de LUFAC, CereBro®: HPC al alcance de todos.
3. Hugo Flores de la Universidad Autónoma Metropolitana, “Extracción de benceno en gasolinas mediante solventes iónicos”.

### **Asignación de espacios:**

1. Todas las actividades de 9:00 a 9:300 y de 18:00 a 19:00 tendrán lugar en el Auditorio “Guillermo Soberón” del Centro de Ciencias Genómicas.
2. Grupo Principiantes (100 registrados): Aulas 1 y 2 de la Licenciatura en Ciencias Genómicas, en el Centro de Ciencias Genómicas de la UNAM, Campus Chamilpa. El café, el té, al agua y las galletas se ofrecerán en el primer pasillo a la entrada del Instituto de Ciencias Físicas, frente al jardín.
3. Grupo Intermedio (50 registrados): Aula 3 de la Licenciatura en Ciencias Genómicas, en el Centro de Ciencias Genómicas de la UNAM, Campus Chamilpa. El café, el té, al agua y las galletas se ofrecerán en el primer pasillo a la entrada del Instituto de Ciencias Físicas, frente al jardín.
4. Grupo Avanzado (30 registrados): Aula I del Instituto de Ciencias Físicas de la UNAM, Campus Chamilpa. El café, el té, al agua y las galletas se ofrecerán en la terraza del mismo edificio del Instituto de Ciencias Físicas, afuera del aula.
5. Grupo de Armadores (13 registrados): Aula V del Instituto de Ciencias Físicas de la UNAM, Campus Chamilpa. El café, el té, al agua y las galletas se ofrecerán en la terraza del mismo edificio del Instituto de Ciencias Físicas, afuera del aula.

## **Instructores:**

1. Linux: Ulises Amaya
2. Introducción a cálculos cuánticos: Jorge Hernández
3. Mecánica Estadística: Ana Laura Benavides
4. Introducción a Docking: César Millán Pacheco
5. Dinámica Molecular: Arlette Méndez y José Alejandro
6. DL\_POLY: Édgar Núñez
7. Método de Monte Carlo: Alejandro Martínez y Jorge López-Lemus
8. MCCCSTowhee: Florianne Castillo
9. GROMACS: Guillermo Méndez
10. NAMD: César Millán Pacheco
11. LAMMPS: Édgar Omar Castrejón
12. Cálculos cuánticos: Jorge Hernández y Humberto Saint Martin
13. NWCHEM: Humberto Saint Martin
14. QM/MM LICHEM: Erik Vázquez Montelongo
15. Modelos de grano grueso: Minerva González
16. Equilibrios entre fases: Héctor Domínguez
17. Interfaces: José Alejandro
18. Interacciones proteína-ligando: Manuel Rivera
19. Docking: Sergio Mares Sámano
20. Cálculos de Energía Libre: Humberto Saint Martin
21. Armado de DM: José Alejandro, Arlette Méndez