

**Inauguración: Lunes 6 de agosto de 8:30 a 9:00 en el Auditorio de la Facultad de Farmacia de la Universidad Autónoma del Estado de Morelos.**

**Grupo de Principiantes**

Hora	Lunes 6**	Martes 7	Miércoles 8	Jueves 9	Viernes 10
9:00 a 11:00	Linux U. Amaya	Introducción a Docking C. Millán	GROMACS A. L. Benavides	DL_POLY E. Núñez	NWCHEM‡ HSM
11:00 a 11:30	Ruptura café				
11:30 a 13:30	Mecánica Estadística A. L. Benavides	Introducción a cálculos cuánticos J. Hernández	GROMACS A. L. Benavides	DL_POLY E. Núñez	Charla H. M. Rivera Panel SICyT
13:30 a 15:00	Comida				
15:00 a 17:00	Método de Monte Carlo J. L. Lemus	Visualización Molden A. Ramírez	Visualización VMD H. Jardón	LAMMPS E. O. Castrejón	
17:00 a 19:00	Dinámica Molecular* A. Méndez	Pósteres 1*	Pósteres 2*	LAMMPS* E. O. Castrejón	

**Grupo de Avanzados**

Hora	Lunes 6**	Martes 7	Miércoles 8	Jueves 9	Viernes 10
9:00 a 11:00	Linux U. Amaya	Práctica con† Monte Carlo S. Figueroa G.	NAMD H. Jardón	LAMMPS E. O. Castrejón	NWCHEM‡ HSM
11:00 a 11:30	Ruptura café				
11:30 a 13:30	Mecánica Estadística A. L. Benavides	Práctica con† Monte Carlo* S. Figueroa G.	DL_POLY E. Núñez	LAMMPS E. O. Castrejón	Charla H. M. Rivera Panel SICyT
13:30 a 15:00	Comida				
15:00 a 17:00	Método de Monte Carlo J. López L.	NAMD H. Jardón	DL_POLY E. Núñez	GROMACS E. Núñez	
17:00 a 19:00	Dinámica Molecular* A. Méndez	Pósteres 1*	Pósteres 2*	GROMACS E. Núñez	

## Tópicos Selectos Genéricos

Hora	Lunes 6	Martes 7	Miércoles 8	Jueves 9	Viernes 10
9:00 a 11:00	NWCHEM <b>HSM</b>	Práctica con† Monte Carlo <b>S. Figueroa G.</b>	Equilibrios entre fases <b>H. Domínguez</b>	Cálculos de energía libre <b>HSM</b>	Ajuste “Force Balance” <b>M. Martínez</b>
11:00 a 11:30	Ruptura café				
11:30 a 13:30	BOMD con NWChem <b>C. I. León</b>	Práctica con† Monte Carlo* <b>S. Figueroa G.</b>	Equilibrios entre fases <b>J. López L.</b>	Cálculos de energía libre <b>HSM</b>	Charla <b>H. M. Rivera</b> Panel SICyT
13:30 a 15:00	Comida				
15:00 a 17:00	Modelos de Grano Grueso <b>M. González</b>	Mezclas de metanol con agua <b>M. Martínez</b>	Interfaces <b>J. Alejandre</b>	Acoplamiento molecular (Docking) <b>S. Mares</b>	
17:00 a 19:00	Modelos de Grano Grueso* <b>M. González</b>	Pósteres 1*	Pósteres 2*	Acoplamiento molecular (Docking) <b>S. Mares</b>	

## Implementación de algoritmos en DM

**J. Alejandre y A. Gamboa**

Hora	Lunes 6	Martes 7	Miércoles 8	Jueves 9	Viernes 10
9:00 a 11:00	ADM1	ADM1	ADM1	ADM1	ADM1
11:00 a 11:30	Ruptura café				
11:30 a 13:30	ADM1	ADM1	ADM1	ADM1	Charla <b>H. M. Rivera</b> Panel SICyT
13:30 a 15:00	Comida				
15:00 a 17:00	ADM1	ADM1	ADM1	ADM1	
17:00 a 19:00	Optativa*	Pósteres 1*	Pósteres 2*	Optativa*	

## **Aplicaciones a Bioquímica y Farmacia**

**C. Millán**

Hora	Lunes 6**	Martes 7	Miércoles 8	Jueves 9	Viernes 10
9:00 a 11:00	Linux <b>U. Amaya</b>	Introducción a Docking <b>C. Millán</b>	ABF	ABF	ABF
11:00 a 11:30	Ruptura café				
11:30 a 13:30	Mecánica Estadística <b>A. L. Benavides</b>	ABF	ABF	ABF	Charla <b>H. M. Rivera</b> Panel SICyT
13:30 a 15:00	Comida				
15:00 a 17:00	Método de Monte Carlo <b>J. L. Lemus</b>	ABF	ABF	ABF	
17:00 a 19:00	Dinámica Molecular* <b>A. Méndez</b>	Pósteres 1*	Pósteres 2*	Optativa*	

\*Incluirá bebidas y bocadillos.

\*\*Estos cursos del lunes 6 se impartirán simultáneamente a los participantes en los grupos de principiantes y avanzados, así como en el de ABF, usando el Auditorio de la Facultad de Farmacia.

†La práctica con Monte Carlo se dará simultáneamente a los grupos de avanzados y de aplicaciones genéricas.

‡La práctica de NWCHEM del viernes 10 se dará simultáneamente a los grupos de principiantes y de avanzados.

### **Asignación de espacios:**

1. La Inauguración se realizará el lunes 6 de agosto, de 8:30 a 9:30, en el Auditorio de la Facultad de Farmacia de la Universidad Autónoma del Estado de Morelos.
2. Grupo Principiantes (41 asistentes): Aulas 1 y 2 de la Facultad de Farmacia de la Universidad Autónoma del Estado de Morelos.
3. Grupo Avanzado (23 asistentes): Aula 3 de la Facultad de Farmacia de la Universidad Autónoma del Estado de Morelos.
4. Grupo Aplicaciones Genéricas (9 asistentes): Aula 4 de la Facultad de Farmacia de la Universidad Autónoma del Estado de Morelos.
5. Implementación de algoritmos en DM (4 asistentes): Aula 5 de la Facultad de Farmacia de la Universidad Autónoma del Estado de Morelos.
6. Aplicaciones a Bioquímica y Farmacia (12 asistentes): Aula 6 de la Facultad de Farmacia de la Universidad Autónoma del Estado de Morelos.

### **Lista de instructores:**

1. Linux, P, A, ABF: Ulises Amaya (ICF-UNAM)
2. Introducción a cálculos cuánticos P: Jorge Hernández (ICF-UNAM)
3. Mecánica Estadística P, A, ABF: Ana Laura Benavides (U de Gto.)
4. Introducción a Docking P, ABF: César Millán (FF-UAEMor.)
5. Dinámica Molecular P, A, ABF: Arlette Méndez (UdG)
6. DL\_POLY: Édgar Núñez (DC-UAMI)
7. Método de Monte Carlo P, A, ABF: Jorge López-Lemus (FC-UAEMex).
8. Prácticas con Monte Carlo A y G: Susana Figueroa Gerstenmaier (U de Gto.).
9. GROMACS: Ana Laura Benavides (U de Gto.), Édgar Núñez (UAM-I)
10. NAMD y Visualización con VMD: Héctor Jardón (Ude Gto.)
11. LAMMPS: Édgar Omar Castrejón (IT-Celaya)
12. NWCHEM, equilibrios entre fases y cálculos de energía libre : Humberto Saint Martin, HSM (ICF-UNAM)
13. BOMD con NWChem: César Iván León Pimentel (ICF-UNAM).
15. Modelos de grano grueso: Minerva González (IF-BUAP).
16. Equilibrios entre fases: Héctor Domínguez (IIM-UNAM), Jorge López Lemus (FC-UAEMex)
17. Interfaces: José Alejandro (DC-UAMI).
18. Acoplamiento molecular (Docking): Sergio Mares Sámano (ICF-UNAM).
19. Implementación de algoritmos en DM José Alejandro (DC-UAMI), Antonio Gamboa (CIQ-UAEMor).
20. Aplicaciones a Bioquímica y Farmacia: César Millán Pacheco (FF-UAEMor).
21. Visualización con molden: Alejandro Ramírez Solís (CinC, UAEMor).
22. Mezclas de metanol con agua y “Force Balance”: Manuel Martínez (ICF-UNAM).