

**Inauguración: Lunes 29 de julio de 8:30 a 9:00 en el Salón Alegro del Hotel
Gamma Puerta Paraíso, en Cuernavaca**

Grupo de Principiantes

<i>Hora</i>	<i>Lunes 29</i>	<i>Martes 30</i>	<i>Miércoles 31</i>	<i>Jueves 1</i>	<i>Viernes 2</i>
<i>9:00 a 11:00</i>	<i>Linux</i>	<i>GROMACS</i>	<i>Visualización Molden</i>	<i>DL_POLY</i>	<i>Visualización VMD</i>
<i>11:00 a 11:30</i>	<i>Ruptura café</i>				
<i>11:30 a 13:30</i>	<i>Mecánica Estadística</i>	<i>GROMACS</i>	<i>NAMD</i>	<i>DL_POLY</i>	<i>Cierre con industriales</i>
<i>13:30 a 15:00</i>	<i>Comida</i>				
<i>15:00 a 17:00</i>	<i>Método de Monte Carlo</i>	<i>Introducción a los cálculos cuánticos</i>	<i>NAMD</i>	<i>LAMMPS</i>	
<i>17:00 a 19:00</i>	<i>Dinámica Molecular*</i>	<i>Pósteres 1*</i>	<i>Pósteres 2*</i>	<i>LAMMPS*</i>	

Grupo de Avanzados

<i>Hora</i>	<i>Lunes 29</i>	<i>Martes 30</i>	<i>Miércoles 31</i>	<i>Jueves 1</i>	<i>Viernes 2</i>
<i>9:00 a 11:00</i>	<i>Práctica con Monte Carlo</i>	<i>Acoplamiento molecular (Docking)</i>	<i>DL_POLY</i>	<i>LAMMPS</i>	<i>Visualización VMD</i>
<i>11:00 a 11:30</i>	<i>Ruptura café</i>				
<i>11:30 a 13:30</i>	<i>Práctica con Monte Carlo</i>	<i>Acoplamiento molecular (Docking)</i>	<i>DL_POLY</i>	<i>LAMMPS</i>	<i>Cierre con industriales</i>
<i>13:30 a 15:00</i>	<i>Comida</i>				

15:00 a 17:00	GROMACS	NWCHEM	Ajuste de barrera de torción	NAMD	
17:00 a 19:00	GROMACS	Pósteres 1*	Pósteres 2*	NAMD	

Tópicos Selectos Genéricos

Hora	Lunes 29	Martes 30	Miércoles 31	Jueves 1	Viernes 2
9:00 a 11:00	Interfaces	Acoplamiento molecular (Docking)	Equilibrios entre fases	BOMD con NWChem	Campos reactivos
11:00 a 11:30	Ruptura café				
11:30 a 13:30	3SSPP	Acoplamiento molecular (Docking)	Equilibrios entre fases	Ajuste "Force Balance"	Cierre con industriales
13:30 a 15:00	Comida				
15:00 a 17:00	Modelos de grano grueso	NWCHEM	Ajuste de barrera de torción	Cálculos de energía libre TI	
17:00 a 19:00	Modelos de grano grueso	Pósteres 1	Pósteres 2	Cálculos de energía libre PMF	

Aplicaciones a Bioquímica y Farmacia

<i>Hora</i>	<i>Lunes 6**</i>	<i>Martes 7</i>	<i>Miércoles 8</i>	<i>Jueves 9</i>	<i>Viernes 10</i>
<i>9:00 a 11:00</i>	<i>Linux</i>	<i>Introducción a Docking</i>	<i>Descriptores farmacológicos</i>	<i>Dinámica molecular de membranas</i>	<i>Métodos de análisis de las trayectorias</i>
<i>11:00 a 11:30</i>	<i>Ruptura café</i>				
<i>11:30 a 13:30</i>	<i>Mecánica Estadística</i>	<i>Docking Autodock Vina</i>	<i>Dinámica molecular de proteínas</i>	<i>Dinámica molecular de membranas</i>	<i>Cierre con industriales</i>
<i>13:30 a 15:00</i>	<i>Comida</i>				
<i>15:00 a 17:00</i>	<i>Método de Monte Carlo</i>	<i>Docking Dock6</i>	<i>Dinámica molecular de proteínas</i>	<i>Dinámica molecular de ácidos nucleicos</i>	
<i>17:00 a 19:00</i>	<i>Dinámica Molecular</i>	<i>Pósteres 1*</i>	<i>Pósteres 2*</i>	<i>Cálculos de Energía Libre PMF</i>	

Implementación de algoritmos en DM

<i>Hora</i>	<i>Lunes 6</i>	<i>Martes 7</i>	<i>Miércoles 8</i>	<i>Jueves 9</i>	<i>Viernes 10</i>
<i>9:00 a 11:00</i>	<i>ADM1</i>	<i>ADM1</i>	<i>ADM1</i>	<i>ADM1</i>	<i>ADM1</i>
<i>11:00 a 11:30</i>	<i>Ruptura café</i>				
<i>11:30 a 13:30</i>	<i>ADM1</i>	<i>ADM1</i>	<i>ADM1</i>	<i>ADM1</i>	<i>Cierre con industriales</i>
<i>13:30 a 15:00</i>	<i>Comida</i>				
<i>15:00 a 17:00</i>	<i>ADM1</i>	<i>ADM1</i>	<i>ADM1</i>	<i>ADM1</i>	
<i>17:00 a 19:00</i>	<i>Optativa</i>	<i>Pósteres 1*</i>	<i>Pósteres 2*</i>	<i>Cálculos de Energía Libre PMF</i>	

Comité Organizador en Morelos:

Dr. César Millán Pacheco, de la Facultad de Farmacia de la Universidad Autónoma del Estado de Morelos.

Dr. Humberto Saint Martin Posada, del Instituto de Ciencias Físicas de la Universidad Nacional Autónoma del Estado de Morelos (organizador principal).

Comité Organizador Nacional:

Dr. Héctor Domínguez Castro, del Instituto de Investigaciones en Materiales de la Universidad Nacional Autónoma de México.

Dra. Ana Laura Benavides Obregón, del Departamento de Ingeniería Física de la Universidad de Guanajuato.

Dra. Susana Figueroa-Gerstenmaier, del Departamento de Ingenierías Química, Electrónica y Biomédica de la Universidad de Guanajuato.

Dr. José Alejandro, del Departamento de Química de la Universidad Autónoma Metropolitana, Unidad Iztapalapa.

Dr. Édgar Núñez Rojas, del Departamento de Química de la Universidad Autónoma Metropolitana, Unidad Iztapalapa.

Dra. G. Arlette Méndez Maldonado, del Centro Universitario de Ciencias Exactas e Ingenierías de la Universidad de Guadalajara.

Lista preliminar de instructores:

Dr. Alejandro Ramírez Solís, Universidad Autónoma del Estado de Morelos.
Dr. César Millán Pacheco, Universidad Autónoma del Estado de Morelos.
Dr. Antonio Gamboa Suárez, Universidad Autónoma del Estado de Morelos.
Dr. Gilberto Valdés García, UNAM-Cuernavaca.
Dr. Humberto Saint Martin, UNAM-Cuernavaca.
Dr. Jorge Hernández Cobos, UNAM-Cuernavaca.
Dr. Sergio Mares Sámano, UNAM-Cuernavaca (Cátedra CONACyT)
M. en C. Manuel Martínez Jiménez, UNAM-Cuernavaca (becario de CONACyT)
M. en C. César Iván León Pimentel, UNAM-Cuernavaca (becario de CONACyT)
Dr. Héctor Domínguez Castro, UNAM-Ciudad de México.
Dra. Susana Figueroa-Gerstenmaier, Universidad de Guanajuato.
Dra. Ana Laura Benavides, Universidad de Guanajuato.
Dra. Arlette Méndez Maldonado, Universidad de Guadalajara.
Dr. José Guillermo Méndez Bermúdez, Universidad de Guadalajara.
Dr. José Alejandro, UAM-Iztapalapa.
Dr. Édgar Núñez, UAM-Iztapalapa.
Dr. Héctor Eduardo Jardón Valadez, Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Lerma.
Dr. Edgar Omar Castrejón González, Instituto Tecnológico de Celaya.
Dra. Minerva González Melchor, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla.
Dr. Jorge López Lemus, Universidad Autónoma del Estado de México.

Ayudantes en el grupo de Aplicaciones a Bioquímica y Farmacia:

L.F. (cM) Carlos Cristian Miranda, Universidad Autónoma del Estado de Morelos.
L.F. (cM) Yelzyn Dolores Galvan Cipres, Universidad Autónoma del Estado de Morelos.
L.F. (cM) Josue Martinez Miranda, Universidad Autónoma del Estado de Morelos.

