

**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

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

Grupo de Avanzados

Hora	Lunes 29	Martes 30	Miércoles 31	Jueves 1	Viernes 2
9:00 a 11:00	GROMACS	Acoplamiento molecular (Docking)	DL_POLY	LAMMPS	Visualización Ovito
11:00 a 11:30	Ruptura café				
11:30 a 13:30	GROMACS	Acoplamiento molecular (Docking)	DL_POLY	LAMMPS	Cierre con industriales
13:30 a 15:00	Comida				
15:00 a 17:00	HooMD	NWCHEM	Ajuste de barrera de torción	NAMD	
17:00 a 19:00	HooMD	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

Hora	Lunes 29	Martes 30	Miércoles 31	Jueves 1	Viernes 2
9:00 a 11:00	Linux	Introducción a Docking	Descriptores farmacológicos	Dinámica molecular de membranas	Métodos de análisis de las trayectorias
11:00 a 11:30	Ruptura café				
11:30 a 13:30	Mecánica Estadística	Docking Autodock Vina	Dinámica molecular de proteínas	Dinámica molecular de membranas	Cierre con industriales
13:30 a 15:00	Comida				
15:00 a 17:00	Método de Monte Carlo	Docking Dock6	Dinámica molecular de proteínas	Dinámica molecular de ácidos nucleicos	
17:00 a 19:00	Dinámica Molecular	Pósteres 1*	Pósteres 2*	Cálculos de Energía Libre PMF	

Implementación de algoritmos en DM

Hora	Lunes 29	Martes 30	Miércoles 31	Jueves 1	Viernes 2
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	Cierre con industriales
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*	Cálculos de Energía Libre PMF	

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. Julio César Armas Pérez, 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.