

**CURSO-TALLER
20 HORAS**

MODELAMIENTO MOLECULAR APLICADO A QUÍMICA, INGENIERÍA QUÍMICA, BIOLOGÍA Y SALUD

ORGANIZA: GI-MATINTEC - FQIQ - UNMSM

VACANTES LIMITADAS

INVERSION

Profesionales: S./ 300.00

Estudiantes: S./ 150.00

Informes: 619-7000 anexo
1206

MECANICA CUANTICA / DINAMICA MOLECULAR / DOCKING



DIA: SABADO 01 Y DOMINGO 02 DE JULIO, 2017
HORARIO: 8:30 - 7:00 PM



EXPOSITORA: KARIM SALAZAR-SALINAS
https://www.researchgate.net/profile/Karim_Salazar-Salinas



AUDITORIO: AUDITORIO DEL CENTRO DE
RESPONSABILIDAD SOCIAL Y EXTENSIÓN
UNIVERSITARIA DE LA FAC. DE QUIMICA E ING.
QUIMICA DE LA UNIVERSIDAD NACIONAL
MAYOR DE SAN MARCOS | CIUDAD
UNIVERSITARIA - AV. GERMÁN AMÉZAGA 375

CONTENIDO DEL CURSO

Sección	Detalle	Tiempo
Focus group	Los integrantes del taller presentaran el área de investigación de su interés y experiencias afín de integrar el equipo y reconocer de qué forma el taller podría integrarse en su trabajo.	1 hora
Introducción al modelamiento	Se hará un resumen sobre la historia del modelamiento molecular y la importancia en diversas áreas de investigación, así como un resumen sobre la diversidad de técnicas matemáticas que permiten el modelamiento (Montecarlo, semiempírico, full atomístico, coarse grain, algoritmo genético, machine learning)	2 horas
Mecánica cuántica	Se impartirá información sobre las funcionales y basis sets más utilizados en los cálculos de la Teoría de la Funcional de la Densidad (DFT, siglas en ingles).	3 horas
Dinámica molecular	Información sobre formulación matemática de los algoritmos de dinámica molecular y diversos campos de fuerza	3 horas
Docking	Enseñanza de técnicas como algoritmo genético para la formación de asociaciones moleculares.	3 horas
Visualización de datos y análisis	Análisis de datos como RMSD, descripción estructural y energético de los resultados. Así como la generación de snapshots y videos	3 horas
Feedback	Los integrantes tendrán la oportunidad de rehacer y repasar secciones no comprendidas. O trabajar sus propios casos de estudio con la guía del instructor	4 horas
Total		20 horas