

MODELADO Y SIMULACION DE MACROMOLECULAS | 2024

- CRONOGRAMA -

MARZO

Viernes 8 - mañana

Unidad 1. Concepto de simulación computacional en ciencia. Introducción.

Unidad 2. Química cuántica.

Viernes 8 - tarde

Práctica 1. Química cuántica: Guía de ejercicios de Gaussian (1)

Viernes 15 - tarde

Práctica 1. Química cuántica: Guía de ejercicios de Gaussian (2)

Viernes 22 - mañana

Unidad 3. Termodinámica estadística.

Unidad 4. Interacciones intermoleculares.

Unidad 5. Mecánica molecular, dinámica de proteínas.

ABRIL

Viernes 5 - tarde

Práctica 2. Parametrización

Viernes 19 - mañana

Clase de consulta.

Viernes 26 - tarde

Práctica 3. Dinámica molecular clásica (1)

MAYO

Viernes 3 - mañana

Parcialito teórico-práctico.

Viernes 3 - tarde

Práctica 3. Dinámica molecular clásica (2)

Viernes 10 - mañana

Unidad 6. Métodos para estimar energía libre + ejemplos de umbrella y aplicaciones.

Unidad 7. Métodos híbridos cuántico-clásicos (QM-MM) + ejemplos de aplicaciones.

Viernes 17 - tarde

Práctica 4. Dinámica molecular: estimación de energía libre

Viernes 24 - mañana

Clase de consultas. Espacio para evacuar dudas; discutir enfoques teóricos desarrollados y aplicados durante las prácticas; discutir diferentes enfoques adoptados por los alumnos durante el parcialito para resolver problemas con más de una posible solución; atacar cuestiones generales y particulares sobre el desenvolvimiento de los alumnos durante los 3 TPs. Contenidos teóricos / prácticos desarrollados al momento.

Actividad práctica. Análisis y presentación de publicaciones.

JUNIO

Viernes 07 - mañana

Parcial teórico-práctico.

Viernes 14 - mañana

Recuperatorio.