

**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](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, semiempirico, 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