

## TEMARIO

Semana	Sesión	Tópico
1	Clase	<b>Introducción y Visualización en Estéreo – Dr. Garduño</b>
	<i>Planeación</i>	<i><b>PLANEACIÓN DE LOS PROYECTOS Y TAREAS</b></i>
2	Clase	<b>Historia de los Métodos de Simulación Molecular – Dr. Garduño</b>
	Clase	<b>Generalidades de los Métodos de Simulación Molecular – Dr. Garduño</b>
3	Clase	<b>Repaso de Química Cuántica – Dr. Garduño</b>
	Clase	<b>Campos de Fuerzas Clásicos</b>
	Clase	<b>Funciones de Energía Potencial – Dr. Garduño</b>
4	Clase	<b>Minimización de la Función de Energía – Dr. Garduño</b>
	Clase	<b>Interacciones Biomoleculares y Termodinámica – Dr. Garduño</b>
5	Clase	<b>Principios Básicos de Dinámica Molecular – Dr. Garduño</b>
	Clase	<b>Termostatos, Baróstatos, Algoritmo de Verlet Sumas de Ewald – Dr. Garduño</b>
6	Clase	<b>Inicialización de una Dinámica Molecular – Dr. Garduño</b>
	Clase	<b>Electrostática y Métodos de Solvatación – Dr. Garduño</b>
7	Clase	<b>Métodos para el Cálculo de la Energía Libre – Dr. Garduño</b>
	Clase	<b>Análisis de la Trayectoria de una Simulación Molecular – Dr. Garduño</b>
8	Clase	<b>Cálculo de Propiedades Termodinámicas – Dr. Garduño</b>
	Clase	<b>Técnicas Avanzadas de Dinámica Molecular – Dr. Garduño</b>
9	Clase	<b>QC/MM para el estudio de Reacciones Enzimáticas – Dr. Garduño</b>
	Clase	<b>Cálculo de la Energía de Asociación – Dr. Garduño</b>
10	Clase	<b>Introducción al Modelado de Grano Grueso – Dr. Garduño</b>
	Clase	<b>Uso de Servidor Gratuito para Simulaciones de Dinámica Molecular – Dr. Garduño</b>
11	Práctica	<b>Simulación de Proteínas en agua I – Dr. Garduño</b>
	Práctica	<b>Simulación de Proteínas en agua II – Dr. Garduño</b>
12	Práctica	<b>Simulación de Proteínas en Membranas I – Dr. Garduño</b>
	Práctica	<b>Simulación de Proteínas en Membranas II – Dr. Garduño</b>
13	Práctica	<b>Simulación de un Complejo Ligando-Proteína I – Dr. Garduño</b>
	Práctica	<b>Simulación de un Complejo Ligando-Proteína II – Dr. Garduño</b>
14	Práctica	<b>Energía Libre de Solvatación – Dr. Garduño</b>
	Seminario	<b>Presentación de artículos - Estudiantes</b>
15	Seminario	<b>Presentación de artículos - Estudiantes</b>
	Seminario	<b>Presentación de artículos - Estudiantes</b>
16	<i>Revisión</i>	<i><b>REVISIÓN FINAL DE PROYECTOS</b></i>
	<i>Revisión</i>	<i><b>REVISIÓN FINAL DE PROYECTOS</b></i>