

TEMARIO

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