

## **Taller: Aplicaciones de dinámica molecular y desarrollo de campos de fuerza**

### **Coordinadores:**

**Dr. Edgar Omar Castrejón González** (ITCelaya) [omar@iqcelaya.itc.mx](mailto:omar@iqcelaya.itc.mx) y **Dr. José Alejandro** (UAM-Iztapalapa) [jra@xanum.uam.mx](mailto:jra@xanum.uam.mx)

**Objetivo.** Usar los programas GROMACS y LAMMPS de Dinámica Molecular en diversas aplicaciones. Revisar las limitaciones de los campos de fuerza OPLS/AA, CHARMM y TraPPE-UA. También, aplicar nuevas estrategias (desarrollados por los investigadores que imparten el curso) para mejorarlos.

**Contenido general.** El curso incluye aplicaciones a líquidos, al equilibrio líquido-vapor y líquido-líquido, así como a sus interfases. Se obtienen propiedades usadas en el proceso de parametrización tales como distribuciones de carga, densidad para líquidos, entalpía de vaporización, constante dieléctrica, tensión superficial, propiedades críticas, energía libre de solvatación y solubilidad, entre otras. Los sistemas incluyen fluidos polares y no-polares, líquidos iónicos, surfactantes y polímeros.

**Requisitos:** El curso está dirigido a usuarios de programas de dinámica molecular (GROMACS, DL\_POLY, NAMD o LAMMPS) con conocimientos básicos de mecánica clásica, química cuántica y termodinámica estadística. Los interesados deberán disponer de tiempo completo para el curso.

Los participantes deberán disponer de una computadora personal con sistema operativo (o máquina virtual) con Linux. Los programas que deben tener instalados antes del inicio del curso son VMD, OVITO, GROMACS, LAMMPS, XMGRACE, FORTRAN y PYTHON.

**Modalidad del curso.** Será teórico-práctico con ejercicios computacionales desarrollados por los participantes.

**Horario:**

<b>Hora/día</b>	<b>Lunes</b>	<b>Martes</b>	<b>Miércoles</b>	<b>Jueves</b>	<b>Viernes</b>
9:00 - 11:00	VMD y OVITO  <i>Jorge López Lemus</i>	GROMACS Equilibrio entre fases I  <i>Héctor Domínguez</i>	GROMACS Constante dieléctrica para líquidos  <i>Edgar Núñez Rojas</i>	GROMACS Simulación de Surfactantes  <i>Héctor Domínguez</i>	LAMMPS Aplicación a nanocompuestos poliméricos  <i>Omar Castrejón</i>
11:00 - 11:30	<b>Receso</b>		<b>Receso</b>	<b>Receso</b>	<b>Receso</b>
11:30 - 13:30	Termostatos, Barostatos y Campos de Fuerza  <i>José Alejandro</i>	GROMACS Equilibrio entre fases II  <i>Jorge López Lemus</i>	GROMACS Interfases y tensión superficial  <i>José Alejandro</i>	GROMACS Solubilidad y energía libre de solvatación  <i>José Alejandro</i>	<b>SESION DE POSTERS</b>
13:30 - 15:00	<b>Comida</b>		<b>Comida</b>	<b>Comida</b>	<b>Comida</b>
15:00 - 17:00	Introducción a GROMACS Aplicación a líquidos  <i>José Alejandro</i>	Distribuciones de carga para líquidos  <i>Javier Carmona</i>	<b>TARDE LIBRE</b>	LAMMPS Aplicación a polímeros  <i>Omar Castrejón</i>	

**Instructores:**

Dr. Jorge López Lemus (UAEMex) [jllemus@uaemex.mx](mailto:jllemus@uaemex.mx)

Dr. José Alejandro (UAM-Iztapalapa) [jra@xanum.uam.mx](mailto:jra@xanum.uam.mx)

Dr. Edgar Núñez Rojas (Conahcyt UAM-Iztapalapa) [eeddgar@yahoo.com.mx](mailto:eeddgar@yahoo.com.mx)

Dr. Héctor Domínguez (IIM-UNAM) [hectordc@unam.mx](mailto:hectordc@unam.mx)

Dr. Javier Carmona (Conahcyt-UAM-Iztapalapa) [jcarmona\\_26@yahoo.com.mx](mailto:jcarmona_26@yahoo.com.mx)

Dr. Edgar Omar Castrejón González (TecNM – Celaya) [omar@iqcelaya.itc.mx](mailto:omar@iqcelaya.itc.mx)