

Nombre del Taller: Dinámica Browniana

Coordinadores: Dr. Ramón Castañeda Priego, Universidad de Guanajuato. Email: ramoncp@ugto.mx, Dr. Salvador Herrera Velarde, Instituto Tecnológico Superior de Xalapa. Email: salvador.hv@xalapa.tecnm.mx.

Objetivo: Promover el desarrollo y la aplicación de Dinámica Browniana entre la comunidad científica mexicana. Durante el Taller se discutirá la metodología necesaria para desarrollar y adaptar el método de Dinámica Browniana en códigos “hechos en casa” y en la plataforma LAMMPS. También habrá prácticas con paquetes de visualización como VMD y cursos introductorios en nivel principiante, siendo un taller teórico - práctico.

Contenido General: El taller de principiantes estará dividido en 9 cursos del **3 al 7 de agosto** de 2026:

1. Linux
2. Mecánica Estadística y Ecuación de Smoluchowski
3. Simulación Molecular
4. Dinámica de Langevin en el límite sobreamortiguado
5. Dinámica Browniana: Ejemplos y adaptación de códigos “caseros”.
6. VMD
7. LAMMPS

Requisitos: Maquina con sistemas operativo Linux y tener instalado: compilador de Fortran, VMD, LAMMPS y además el graficador XMGRACE. Modalidad del curso: **Remota**.

Día/hora	Lunes 3	Martes 4	Miércoles 5	Jueves 6	Viernes 7
9:00 – 11:00 hrs	Linux	Simulación Molecular	Dinámica Browniana	LAMMPS	
11:00 a 11:30 hrs	Descanso	Descanso	Descanso	Descanso	Descanso
11:30 – 13:30 hrs	Mecánica Estadística	Dinámica de Langevin	Dinámica Browniana	LAMMPS	
13:30 – 15:00 hrs	Comida	Comida	Comida	Comida	Comida
15:00 – 17:00 hrs	Ecuación de Smoluchowski	Dinámica de Langevin	VMD & XMGRACE	LAMMPS	
17:00 – 19:00 hrs					

1. Breve repaso de Mecánica Estadística de Equilibrio (1.5 horas).
2. Elementos comunes de la Simulación Molecular (1 hora).
3. Dinámica de Langevin: límite sobreamortiguado (1 hora).
4. Algoritmo de Ermak-McCammon y aplicaciones (2.5 horas).