

Pharmaceutical and Biotechnological
Innovation-Services SAS de CV



Registro RENIECYT-SECIHTI: 2000001

Diplomado en Métodos de Estructura Electrónica

Valor curricular de RED SEP-CONOCER: ECO 301



Sincrónico y asincrónico

Sesiones por Zoom para dudas (1 vez por semana, horario a acordar)

Material y clases grabadas <https://pharbiois.milaulas.com/>

Clase muestra: 1 de noviembre del 2025 (Registro:

<https://www.pharbiois.com/contacto>)

Fresno Norte No 14. San Miguel Tehuisco, Alcaldía Tlalpan C.P.14500
pharmacologicalandbiotechnology@gmail.com

Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



Inicia: 10 de noviembre del 2025

Profesor: Dra Brenda Manzanilla Viveros, SNI-1

<https://www.linkedin.com/in/brenda-manzanilla-a3155a6a/?originalSubdomain=mx>

Duración: 2 meses (120 horas)

ACERCA DEL DIPLOMADO

El Diplomado está diseñado para adquirir conocimientos teóricos y prácticos que permitan realizar cálculos confiables sobre estructura electrónica, propiedades moleculares, reactividad química y termoquímica. Se estudian los fundamentos de la mecánica cuántica y métodos como ab initio, semiempíricos, DFT y mecánica molecular. Además, se realizan prácticas con software libre como GAMESS, Avogadro y GROMACS, incluyendo instalación, búsqueda conformacional, análisis de HOMO-LUMO, descriptores DFT, formación molecular y mecanismos de reacción. Está dirigido a estudiantes, docentes e investigadores con conocimientos básicos de química general y estructura atómica. Al finalizar, podrás aplicar herramientas computacionales para el diseño y análisis de sistemas químicos y bioquímicos.

PROGRAMA

Módulo 1: Introducción

1. Introducción al curso y método de trabajo
2. Breve repaso de la estructura del átomo
3. Antecedentes de la Mecánica Cuántica
4. Breve repaso de las soluciones a la ecuación de Schrödinger
5. Notación de Dirac
6. Construcción de matriz Z

Módulo 2: Métodos aproximados 1

7. Átomos Multielectrónicos
8. Aproximación de Born-Oppenheimer
9. Superficie de Energía Potencial

Módulo 3: Métodos aproximados 2

Fresno Norte No 14. San Miguel Tehuisco, Alcaldía Tlalpan C.P.14500
pharmacologicalandbiotechnology@gmail.com

- 10. Métodos *ab initio*
- 11. Métodos Semiempíricos
- 12. Teoría de Funcionales de la Densidad (DFT)
- 13. Descriptores de la DFT
- 14. Mecánica Molecular
- 15. Práctica computacional 1

Módulo 4: Técnicas

- 16. Conocer software computacional
- 17. Búsqueda conformacional
- 18. Práctica computacional 2
- 19. Funciones de base
- 20. Modelos de solvatación
- 21. Práctica computacional 3
- 22. Práctica computacional 4
- 23. Termoquímica
- 24. Práctica computacional 5
- 25. Mecanismos de reacción
- 26. Práctica Computacional 5

PRÁCTICAS

Práctica 0: Conocer software computacional. Se realizará la instalación del programa GAMESS y visualizadores para analizar resultados. Además de conocer el uso de otros programas y visualizadores.

Practica 1: Comparación de métodos aproximados en GAMESS, como parte de la calibración de la metodología. Se realizarán pruebas en GAMESS con los distintos métodos aproximados con el fin de que aprender a seleccionar el método más apropiado para el sistema que se quiere estudiar.

Práctica 2: Búsqueda conformacional. Aprender a realizar búsquedas conformacionales manual y utilizando programas computacionales mediante mecánica molecular como Avogadro, Spartan y Gromacs.

Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



Practica 3: Comparación de funciones base y modelos de solvatación. El objetivo es conocer los efectos de tener diferentes funciones base como parte de la calibración de la metodología. Además, añadir el solvente para emular las condiciones en las que se lleva a cabo una reacción química y calcular las propiedades y reactividad química de una molécula.

Practica 4: Cálculo de los descriptores de la DFT conceptual. Se realizarán cálculos para obtener los descriptores de la DFT conceptual (potencial de ionización vertical, afinidad electrónica vertical, dureza química, entre otros), empleando aproximaciones finitas y orbitales frontera. Además, se utilizará la combinación de diferentes niveles de teoría (funcional de la DFT y conjunto base) agregando el efecto del solvente. Está práctica incluye el obtener los orbitales frontera HOMO y LUMO.

Práctica 5: Cálculo de la termoquímica. Se evaluará la formación de una molécula mediante cálculos de energía y frecuencia, para obtener energías de formación. Como ejemplo se usará una reacción de Diels Alder y la formación de un líquido iónico para analizar el error de superposición de base (BSSE)

Práctica 6: Cálculo de la termoquímica 2. Se añadirá un estado de transición y el cálculo de la energía de activación.

Las prácticas se podrán realizar en equipos de cómputo laptops con Windows y Linux sin dificultad.

Inversión: \$ 3,520.00 MXN (201.4 USD).

Para inscribirse en México hacer pago a la cuenta CLABE SANTANDER: 0141-8065-5079-1315-04, a nombre de Pharmaceutical and Biotechnological Innovation Services SAS De CV. El comprobante se manda al correo: pharmaceuticalandbiotechnology@gmail.com o ventas@pharbiois.com. Para fuera de México y en México, también puede pagar: <https://bit.ly/46t0h57> (**PayPal**, **MERCADO PAGO** y **stripe** (TDD, TDC, OXO, etc)). Descuentos 10 % estudiantes de licenciatura o haber tomado 2 o más cursos y/o diplomados en pharbiois.com, 5 % estudiantes de Posgrado y posdocs, profesores/investigadores de tiempo parcial, haber tomado un cursos y/o diplomado en pharbios.com.

Fresno Norte No 14. San Miguel Tehuisco, Alcaldía Tlalpan C.P.14500
pharmacologicalandbiotechnology@gmail.com