

# Curso de Métodos de Estructura Electrónica

## Acerca de este curso

Este curso es una formación introductoria pero profunda en **química computacional**, enfocada en los **métodos de estructura electrónica**, desde sus fundamentos teóricos hasta aplicaciones prácticas con software libre. A lo largo del programa aprenderás a utilizar métodos **ab initio**, **semiempíricos** y **DFT**, así como herramientas de **mecánica y dinámica molecular**, para analizar moléculas, optimizar geometrías y calcular propiedades químicas relevantes para investigación.

Aprenderás a:

- Optimizar geometrías moleculares y explorar conformaciones.
- Calcular propiedades electrónicas clave: **HOMO–LUMO, cargas, potencial electrostático, momentos dipolares**, entre otras.
- Estimar **entalpías de formación** y parámetros termodinámicos.
- Comprender y aplicar métodos computacionales como **Hartree–Fock, DFT, mecánica molecular, dinámica molecular y Monte Carlo**.
- Utilizar software libre como **Avogadro** y **VMD** para visualizar estructuras y analizar resultados.

El curso requiere conocimientos básicos de química general, pero no experiencia previa en cómputo científico.

Al finalizar, tendrás la capacidad de **aplicar herramientas computacionales**

para estudiar propiedades mecánico-cuánticas y predecir la reactividad molecular, habilidades fundamentales en química, bioquímica, ciencia de materiales y diseño de fármacos.

## Perfil del aprendiz

El curso está dirigido a estudiantes, profesionistas e investigadores que desean introducirse formalmente a la **química computacional** y al análisis de **propiedades electrónicas** de moléculas. El participante ideal posee interés por comprender la base teórica de los métodos cuánticos y aplicarlos a problemas reales en química, bioquímica, ciencia de materiales o diseño de fármacos.



### Conocimientos previos deseables

- Conocimientos básicos de **química general** y estructura atómica.
- Familiaridad elemental con enlaces químicos, orbitales y geometría molecular.
- Nociones matemáticas básicas (álgebra y conceptos iniciales de cálculo).
- No se requiere experiencia previa en química computacional ni en programación.



### Perfil académico recomendado



- Estudiantes de licenciatura o posgrado en:

Química, Bioquímica, Biología molecular, Farmacología, Ingeniería química, Ciencia de materiales, Nanotecnología, O áreas afines

- Profesionales de industria interesados en aplicar métodos computacionales para apoyar investigación, desarrollo o caracterización molecular.

## Modalidad

Acceso inmediato a los contenidos del curso tras la inscripción, a través de las plataforma <https://pharbiois.milaulas.com>.

Se ofrecen 24 horas de contenido grabado que se pueden seguir de manera asincrónica, junto con material seleccionado, como artículos científicos y vídeos de expertos en la materia.

Este curso está diseñado para completarse en un plazo de cinco semanas, pero su modalidad asincrónica y el acceso ilimitado durante un año permiten a los participantes avanzar según su disponibilidad y revisar los temas cuando lo necesiten.

El acompañamiento personalizado de nuestros instructores estará disponible de forma continua a lo largo de la duración del curso.

Al completar al menos el 80% de las actividades del curso, recibirán una certificación tras evaluar la calidad en el curso y la atención brindada por Pharbiois a través de las plataformas de Survey Monkey en <https://www.surveymonkey.com/r/JHTDNF6> y Google Maps en

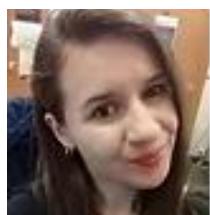
<https://g.page/r/CRpW33pcN6YZEBM/review>, o por correo electrónico a la dirección [ventas@pharbios.com](mailto:ventas@pharbios.com), con el asunto “Opinión metodos de estructura elctrónica PHC06”.

## Validez

La certificación de este curso cuenta con respaldo oficial y curricular de la Secretaría de Educación Pública de México, a través de la red SEP-CONOCER, con el estándar de competencia EC0301 y EC0366.

## Instructor

### Dra. Brenda Manzanilla



La **Dra. Brenda Manzanilla Viveros** es investigadora en química teórica y computacional, especializada en el estudio de estructuras electrónicas, reactividad molecular, diseño racional de materiales y automatización de flujos de trabajo en química computacional. Su trabajo integra métodos de la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT), descriptores de reactividad, modelado molecular y técnicas de machine learning aplicadas a sistemas químicos y materiales avanzados.

Es doctora en química por la Universidad de Guanajuato, donde también impartió cursos en el área de química cuántica y modelado molecular, contribuyendo a la formación de estudiantes en química computacional. Tras su etapa académica inicial, trabajó en la industria como química computacional, desarrollando metodologías para el análisis de polímeros avanzados y el diseño de materiales mediante herramientas teóricas y computacionales.

Posteriormente realizó un posdoctorado en el Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea (ISQCH-CSIC, España), donde se enfocó en la automatización de cálculos, desarrollo de metodologías computacionales y análisis conceptual DFT para moléculas orgánicas, materiales emergentes y complejos metálicos.

La Dra. Manzanilla ha publicado investigaciones que abarcan desde química computacional fundamental —incluyendo propiedades electrónicas, reactividad, funciones de Fukui y análisis

conceptual DFT— hasta aplicaciones prácticas como el diseño de antioxidantes, nanovectores basados en grafeno y materiales funcionales. También ha desarrollado flujos de trabajo para predicción de propiedades mediante docking, QM/MM y métodos semiempíricos de nueva generación.

Además de su labor investigadora, participa activamente en docencia y divulgación científica, combinando precisión teórica con un enfoque pedagógico accesible orientado a acompañar a estudiantes y profesionales en la comprensión profunda de la química computacional moderna.

## Temario

1. La estructura del Átomo
2. Antecedentes de la Mecánica Cuántica
3. La ecuación de Schrödinger
4. Átomos Multilectrónicos
5. Aproximación de Hartree-Fock
6. Aproximación de Born-Oppenheimer
7. Superficie de Energía Potencial
8. Métodos Ab initio
9. Métodos Semi empíricos
10. Teoría Funcionales de la Densidad
11. Mecánica Molecular
12. Dinámica Molecular y Monte Carlo

## Actividades complementarias:

Práctica 1: Optimización de geometría

El estudiante aprenderá los comandos básicos de entrada para obtener geometrías, frecuencias vibracionales de la molécula de estudio y realizar



análisis conformacional. Se probarán distintos métodos y bases para comparar los resultados. Se usarán visualizadores gratuitos como Avogadro y VMD para visualizar los resultados.

### Práctica 2: Cálculo de propiedades moleculares

El estudiante aprenderá a calcular distintos modelos de cargas moleculares, momentos dipolares, potencial electrostático y orbitales frontera HOMO y LUMO que servirán para realizar la reacción de Diels- Alder. Por último, obtendrán descriptores de la reactividad química de la Teoría de Funcionales de la Densidad Conceptual como son energía de ionización y afinidad electrónica y dureza para evaluar el comportamiento químico de una molécula.

### Práctica 3: Cálculo de entalpía de formación

El estudiante aprenderá a calcular la entalpia de formación de una molécula.

## Instrucciones de registro

1. Realiza tu inversión a través de las plataformas disponibles en:  
<https://www.pharbiois.com/inscribirme-estructura>
2. Envía el comprobante de pago a [ventas@pharbiois.com](mailto:ventas@pharbiois.com) con el asunto “Inscripción Dinámica Molecular PHC03” (si requieres factura, incluye tu Constancia de Situación Fiscal).
3. Recibirás por correo electrónico toda la información necesaria para acceder a las sesiones grabadas.



## Descuentos disponibles

En Pharbios, creemos firmemente en la importancia de contribuir a la educación de la juventud mexicana y latinoamericana. Por ello, ofrecemos descuentos especiales para los siguientes grupos:

- Estudiantes de Licenciatura o Pregrado, del 10%
- Estudiantes de Posgrado, del 5%
- Antiguos estudiantes de Pharbios, del 5%
- Referidos por antiguos estudiantes de Pharbios, del 5%
- Asistentes a la Masterclass Gratuita de Dinámica Molecular de Proteínas en Medio acuoso, del 20%

Si eres elegible para alguno de estos descuentos, envíanos un correo a [ventas@pharbios.com](mailto:ventas@pharbios.com) con el asunto “Descuento métodos de estructura electrónica PHC06”.

## Conoce todos nuestros productos y servicios

### Masterclass GRATIS

Organizado en colaboración con Pharbios, este evento reúne a expertos en ciencia, tecnología e innovación para explorar y compartir avances en salud, biotecnología y emprendimiento científico en temáticas “in silico”. Con conferencias magistrales, talleres especializados y espacios de *networking*, fomentando la colaboración interdisciplinaria, brindando una experiencia enriquecedora para profesionales y estudiantes. Registro para recibir link de ZOOM: <https://www.pharbios.com/contacto>

### Cursos y Diplomados en Farmacéutica Computacional

Conoce nuestros más de 30 Cursos y 7 Diplomados respaldados por la Secretaría de Educación Pública de México (SEP) a través de la red SEP-CONOCER. Más información: <https://www.pharbios.com>.

## **Servicios de Apoyo a la Investigación**

Entendemos que los recursos computacionales, el tiempo y el aprendizaje de nuevas técnicas pueden ser factores limitantes en la investigación. Por ello, ofrecemos servicios especializados para la comunidad científica, realizados por expertos y garantizados por Pharbios.

- Análisis bioestadísticos
- Simulaciones de acoplamiento (*docking*) y dinámica molecular
- Alquiler de tiempo y capacidad de cómputo
- Redacción de patentes
- Diseño y desarrollo de proyectos de investigación
- Edición de figuras creativas y técnicas
- Traducción y corrección de textos al inglés
- Asesoría para emprendedores
- Diseño de proyectos de investigación la sector farmacéutico
- Diseño *in silico* de nuevas moléculas patentables
- Repositionamiento de fármacos mediante herramientas *in silico* y validación experimental de manera conjunta con los Laboratorios de Especialidades Inmunológicas (LE).
- Estudios de toxicoinformática alineados a las guías de la ICHM7, M12 y Q3 y a la OEDC.
- Análisis de datos omicos (metabolómica, transcriptómica y proteómica)
- Servicios de optimización de RNAm (<https://alawal-one.vercel.app/>)

## **Kits para medir radicales libres**

Disponibles en nuestra página web: <https://www.pharbios.com/reactivos-kits>

### **Kit ABTS (Capacidad Antioxidante Total)**

## Kit DPPH (Determinación de Radicales Libres)

---

## Kit FRAP (Capacidad Reductora del Poder Antioxidante)

---

### ¿Por qué elegir nuestros kits ABTS, DPPH y FRAP?

- ✓ Protocolos detallados y paso a paso
  - ✓ Diseñados para laboratorio académico, clínico o industrial
  - ✓ Materiales de calidad y reactivos preparados para uso inmediato
  - ✓ Compatible con equipos estándar de espectrofotometría
  - ✓ Resultados cuantitativos reproducibles
- 

### Disponibles en Mercado Libre

Estos kits están también disponibles para compra directa en Mercado Libre ([https://listado.mercadolibre.com.mx/kits-pharbiois#D\[A:kits%20pharbiois\]](https://listado.mercadolibre.com.mx/kits-pharbiois#D[A:kits%20pharbiois])), lo que facilita su adquisición. Cada kit incluye:

-  Reactivos necesarios
-  Instrucciones claras para la ejecución
-  Guía de análisis de resultados
-  Soporte técnico Pharbiois

 Ideal para docencia, investigación y análisis comparativos de antioxidantes.

---

## Conoce todos nuestros libros

### 1. Bioinformática General

Una obra integral que presenta los fundamentos y aplicaciones de la **bioinformática moderna** en investigación biomédica, análisis de datos biológicos y diseño de estudios computacionales.

Ideal para: estudiantes de bioinformática, biotecnología, biología molecular y profesionales que desean fortalecer sus habilidades analíticas.

---

## **2. Modelado Molecular y Bioinformática Estructural**

Este libro se centra en los métodos y herramientas computacionales utilizados para estudiar estructuras moleculares, interacciones químicas y propiedades físicas de sistemas biológicos, incluyendo workflows reproducibles paso a paso.

Ideal para: quienes trabajan con análisis estructural de proteínas, interacción ligando–proteína y evaluación de conformaciones moleculares.

---

## **3. Inmunoinformática y Nanovacunas**

Una guía especializada que une **inmunología computacional** con el diseño de **nanovacunas**, abordando estrategias de predicción de epítopes, modelado estructural de antígenos y simulaciones para optimizar respuestas inmunológicas.

Ideal para: investigadores y estudiantes en inmunología, vacunas y bioinformática aplicada.

---

## **4. Acoplamiento Molecular (Docking): Principios y Aplicaciones**

Una obra dedicada a los conceptos teóricos y prácticos del **acoplamiento molecular**, incluyendo el uso de herramientas libres, interpretación de resultados, evaluación de afinidades y su aplicación al diseño racional de fármacos. Ideal para: químicos,

farmacólogos y profesionales que aplican docking en descubrimiento de ligandos y optimización de leads.

Más información: <https://www.pharbiois.com/consultoria-y-servicios> o al correo electrónico: [ventas@pharbiois.com](mailto:ventas@pharbiois.com).

