

Diplomado en Métodos de Estructura Química-Electrónica

Acerca de este 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.

Perfil del aprendiz

El Diplomado está dirigido a estudiantes, docentes, profesionistas e investigadores interesados en adquirir una formación sólida y aplicada en estructura electrónica, reactividad molecular y métodos de química computacional. El participante ideal posee conocimientos previos de



química general, estructura atómica y fundamentos básicos de enlaces químicos, y desea profundizar en los principios teóricos que gobiernan el comportamiento electrónico de los sistemas moleculares. Este diplomado es adecuado para personas que buscan integrar mecánica cuántica, métodos ab initio, métodos semiempíricos, DFT, mecánica molecular y simulaciones computacionales dentro de su formación académica o trabajo de investigación. El alumno debe tener interés por comprender la relación entre teoría y práctica, resolver problemas químicos mediante modelos matemáticos y aplicar herramientas computacionales para analizar sistemas reales en química, bioquímica, farmacología, ciencia de materiales o nanotecnología. Al finalizar, el alumno será capaz de aplicar de manera autónoma herramientas de química computacional para el diseño, predicción y análisis de sistemas químicos y bioquímicos, fortaleciendo su capacidad de investigación, docencia o práctica profesional en áreas que demandan conocimientos avanzados de modelación y simulación molecular.

Modalidad

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

Se ofrecen 120 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 diplomado está diseñado para completarse en un plazo de 8 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 diplomado.

Al completar al menos el 80% de las actividades del diplomado, 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@pharbiois.com, con el asunto “Opinión química cuántica fundamental PHC19”.

Validez

La certificación de este diplomado 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

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

1. Átomos Multieletrónicos
2. Aproximación de Born-Oppenheimer
3. Superficie de Energía Potencial



Módulo 3: Métodos aproximados 2

1. Métodos ab initio
2. Métodos Semiempíricos
3. Teoría de Funcionales de la Densidad (DFT)
4. Descriptores de la DFT
5. Mecánica Molecular
6. Práctica computacional 1

Modulo 4: Técnicas

1. Conocer software computacional
2. Búsqueda conformacional
3. Práctica computacional 2
4. Funciones de base
5. Modelos de solvatación
6. Práctica computacional 3
7. Práctica computacional 4
8. Termoquímica
9. Práctica computacional 5
10. Mecanismos de reacción
11. 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.

Práctica 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 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.

Práctica 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.

Práctica 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. Esta 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.

Instrucciones de registro

1. Realiza tu inversión a través de las plataformas disponibles en: <https://www.pharbiois.com/inscribirme-diplomado-estructura-electronica>
2. Envía el comprobante de pago a ventas@pharbiois.com con el asunto “diplomado_metodos_estructura_electrónica PHD03” (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 Pharbiois, 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 Pharbiois, del 5%
- Referidos por antiguos estudiantes de Pharbiois, 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@pharbiois.com con el asunto “Descuento química cuántica aplicada PHD03”.

Conoce todos nuestros productos y servicios

Masterclass GRATIS

Organizado en colaboración con Pharbiois, 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.pharbiois.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.pharbiois.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 Pharbiois.

- 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
- Reposicionamiento 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 OECD.
- 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.pharbiois.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.