

Pharmaceutical and Biotechnological
Innovation-Services SAS de CV

www.pharbiois.com



Registro RENIECYT-CONAHCYT: 2000001

Diplomado en Métodos de Estructura Electrónica



Sincrónico y asincrónico

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

Material y clases grabadas por Google Classroom

Profesor: Dra Brenda Manzanilla Viveros

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

Inicia: 22 de julio del 2024

Duración: 2 meses (120 horas)

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

Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



ACERCA DEL DIPLOMADO

Este diplomado está desarrollado para obtener los conocimientos básicos para poder realizar cálculos computacionales. En el cuál para poder obtener resultados confiables es importante tener las bases teóricas de cómo trabaja un programa para realizar cálculos de estructura electrónica para obtener propiedades, reactividad química, termoquímica, entre otras. Después de ver la teoría se realizarán cálculos computacionales empleando software libre para el aprendizaje.

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

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.

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

Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



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.

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.