

Curso de Química Cuántica Aplicada

Acerca de este curso

Este curso avanzado de química cuántica permite comprender el comportamiento electrónico de átomos y moléculas mediante métodos matemáticos y computacionales para predecir propiedades químico-estructurales. Se recomienda haber cursado previamente los cursos de Métodos de Estructura Electrónica y Química Cuántica Fundamental. Al finalizar, el estudiante aplicará técnicas avanzadas de simulación cuántica con bases teóricas sólidas.

Perfil del aprendiz

Este curso está dirigido a estudiantes, profesionistas e investigadores que buscan profundizar en los fundamentos teóricos y computacionales de la **química cuántica avanzada**, con el fin de analizar y predecir propiedades electrónicas y estructurales de átomos y moléculas. El participante ideal es alguien con formación científica sólida, interés por la modelación matemática de sistemas químicos y la aplicación práctica de métodos computacionales para resolver problemas reales en química teórica, fisicoquímica, bioquímica o ciencia de materiales.

Se recomienda firmemente que el estudiante haya cursado previamente los módulos de **Métodos de Estructura Electrónica y Química Cuántica Fundamental**, que cuente con conocimientos equivalentes en mecánica cuántica básica, operadores, estructura atómica y modelos moleculares simples. El alumno debe sentirse cómodo con conceptos matemáticos como

álgebra lineal, funciones de onda, derivadas, integrales y ecuaciones diferenciales, así como tener nociones generales de programación o manejo de software científico.

Modalidad

Acceso inmediato a los contenidos del curso tras la inscripción, a través de la 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 seis 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@pharbiois.com, con el asunto “Opinión química cuántica fundamental PHC19”.

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

Introducción al curso

- Bienvenida y presentación del curso
- Examen diagnóstico
- Libros de consulta

Unidad I: Fundamentos matemáticos

- Álgebra lineal: Vectores
- Álgebra lineal: Matrices
- Matrices: Propiedades
- Matrices: Determinantes
- Ejercicio: Determinante
- Espacio complejo
- Álgebra lineal: Cambio de base
- Álgebra lineal: Problema de eigenvalores
- Matrices como funciones
- Método variacional

Unidad II: Repaso de la ecuación de Schrödinger

- Repaso del átomo hidrogenoide
- Unidades atómicas
- Repaso de la ecuación de Schrödinger
- La aproximación de Born-Oppenheimer

Unidad III: Problema de la función de onda multielectrónica

- Los spin orbitales
- Principio de Exclusión de Pauli
- Determinante de Slater
- El producto Hartree

Unidad IV: Operadores y elementos de matriz

- Introducción
- Método pseudo-clásico de interpretación energética
- Transición de spin orbitales a espaciales
- Modelo de H₂
- Determinantes excitados
- Forma de la función de onda exacta
- Elementos de matriz del Hamiltoniano para H₂
- Notación para uno y dos electrones
- Reglas generales
- Operadores de spin

Unidad V: Aproximación de Hartree-Fock

- Ecuaciones de Hartree-Fock
- Interpretación de las soluciones HF
- Ecuaciones de Roothaan

Unidad VI: Conjuntos de bases poliatómicas

- Funciones Gaussianas contraídas
- Conjunto de bases mínimas: STO-3G
- Conjuntos de base doble Z
- Conjuntos de bases polarizadas y difusas

Unidad VII: Cálculos de capa abierta y cerrada

- Cálculos RHF y UHF
- Comparación y criterios de selección

Unidad VIII: Más allá de Hartree-Fock

- Limitaciones de HF: correlación electrónica
- Panorama general de métodos post-HF
- Introducción a DFT

Prácticas computacionales

Práctica 0: Instalación de programas

- Instalación y configuración de ORCA, Avogadro 2 y Multiwfn

Práctica 1: Optimización de geometría y cálculo de frecuencias con ORCA

- Optimización de geometría molecular y obtención de frecuencias vibracionales

Práctica 2: Comparación de métodos y conjuntos de bases

- Calibración metodológica: efecto del funcional y del conjunto de bases en propiedades moleculares

Práctica 3: Cálculos de capa abierta y cerrada con ORCA

- Energías, potenciales de ionización, análisis de población y momento dipolar

Práctica 4: Análisis de propiedades con Multiwfn

- Análisis de orbitales moleculares, cargas atómicas y propiedades electrónicas
- Nota: durante el desarrollo del curso se calificará en 70% y un examen final y/o actividad con calificación del 30%

Software utilizado

- ORCA (cálculos de estructura electrónica)
- Avogadro 2 (visualización y construcción de moléculas)
- Multiwfn (análisis de propiedades moleculares)

Material

- Libros de consulta en Google Classroom, libres para descargar.
- Scripts en Python para automatizar tareas.
- Inputs de trabajo.
- PDF de las clases disponibles en la plataforma.
- Videos clases grabadas.
- Videos de instalación de programas.
-

Instrucciones de registro

1. Realiza tu inversión a través de las plataformas disponibles en: <https://www.pharbiois.com/inscribirme-cuantica-aplicada>
2. Envía el comprobante de pago a ventas@pharbiois.com con el asunto “química_cuántica_aplicada PHC19” (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 PHC19”.

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 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.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.

