

Curso de Métodos de Estructura Electrónica

Acerca de este curso

Este curso ofrece una formación introductoria y profunda en química computacional, enfocada en los métodos de estructura electrónica desde sus fundamentos teóricos hasta aplicaciones prácticas con software libre. Se estudian los métodos ab initio, semiempíricos, DFT y mecánica molecular, así como una introducción a la dinámica molecular. Al finalizar, el estudiante podrá aplicar herramientas computacionales para el análisis, diseño y predicción de sistemas químicos y bioquímicos.

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 la plataforma <https://pharbiois.milaulas.com>.

Se ofrecen 40 horas de contenido grabado que se pueden seguir de manera asincrónica, junto con material seleccionado, como artículos científicos y videos 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@pharbiois.com, con el asunto “Opinión metodos de estructura electrónica 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

Introducción al curso

- Presentación y plan de trabajo
- Libros de consulta
- Cuestionario diagnóstico

Unidad I: Estructura del átomo

- Estructura del átomo

Unidad II: Antecedentes de la Mecánica Cuántica

- Antecedentes de la Mecánica Cuántica
- Radiación del cuerpo negro y la catástrofe ultravioleta

Unidad III: Ecuación de Schrödinger

- La ecuación de Schrödinger
- Las soluciones a la ecuación de Schrödinger

Unidad IV: Átomos multielectrónicos

- Introducción
- Átomos multielectrónicos: métodos aproximados
- Método variacional
- Teoría de perturbaciones

Unidad V: Superficie de Energía Potencial y Matriz Z

- Superficie de Energía Potencial
- Construcción de la Matriz Z

Unidad VI: Notación de Dirac

- Notación de Dirac

Unidad VII: Métodos Ab initio

- Métodos Ab initio

Unidad VIII: Métodos Semiempíricos

- Métodos semiempíricos

Unidad IX: Teoría de Funcionales de la Densidad

- Teoría de Funcionales de la Densidad
- Teoremas de DFT
- DFT Conceptual Parte 1
- DFT Conceptual Parte 2: Teoremas

Unidad X: Mecánica Molecular

- Mecánica Molecular

Unidad XI: Dinámica Molecular

- Introducción a la Dinámica Molecular
- Práctica con GROMACS

Prácticas computacionales

Práctica 0: Instalación de programas

- Instalación y configuración de ORCA, Avogadro 2, Multiwfn y GROMACS

Práctica 1: Comparación de métodos aproximados con ORCA

- Calibración de metodología: selección del método más apropiado para el sistema de estudio

Práctica 2: Búsqueda conformacional

- Búsqueda conformacional manual y escalonada con Avogadro 2 y ORCA

Práctica 3: Modelos de solvatación y funciones base

- Efecto del solvente y comparación de conjuntos de bases con ORCA

Práctica 4: Cálculo de descriptores DFT Conceptual

- Potencial de ionización, afinidad electrónica, dureza química, funciones de Fukui y orbitales HOMO-LUMO con ORCA y Multiwfn (con scripts de trabajo en Python)

Práctica 5: Termoquímica y mecanismos de reacción

- Cálculo de entalpías de formación, estados de transición y energías de activación con ORCA (scripts en Python)

Práctica 6: Dinámica Molecular con GROMACS

- Simulación básica de dinámica molecular: preparación del sistema, equilibración y análisis de trayectorias (scripts de trabajo en Python)

Software utilizado

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

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.

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 entalpía 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 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 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 métodos de estructura electrónica PHC06”.

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.

