

Curso de Química Cuántica Fundamental

Acerca de este curso

Este curso permite comprender el comportamiento de átomos y moléculas desde un enfoque matemático, esencial para el uso de herramientas computacionales en química teórica. Se abordan los fundamentos de la mecánica cuántica, los principales modelos cuánticos y su conexión con datos experimentales. Al finalizar, el estudiante podrá interpretar modelos cuánticos y realizar simulaciones moleculares básicas con software de uso actual.

Perfil del aprendiz

El **Curso de Química Cuántica Fundamental** está dirigido a estudiantes y profesionales de química, bioquímica, biología molecular, ingeniería química, nanociencias, ciencia de materiales y áreas afines que buscan comprender el comportamiento de átomos y moléculas desde un enfoque matemático y físico. El participante ideal cuenta con bases en matemáticas y física, así como conocimientos previos en modelado molecular; de preferencia, haber cursado el **Curso de Métodos de Estructura Electrónica**, ya que este programa profundiza en los fundamentos teóricos que sustentan las herramientas computacionales utilizadas en química teórica. El estudiante debe tener interés por los principios que gobiernan los fenómenos cuánticos, la estructura electrónica y la reactividad molecular, además de motivación por relacionar conceptos formales con aplicaciones prácticas..

Modalidad

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

Se ofrecen 16 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 PHC16”.

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 del curso y método de trabajo

Unidad I: Introducción a la Mecánica Cuántica

- Introducción a la Química Cuántica — contexto histórico y motivación
- Radiación del cuerpo negro
- Efecto fotoeléctrico
- Hipótesis de De Broglie
- El principio de incertidumbre

Unidad II: Postulados de la Mecánica Cuántica

- Postulados de la Mecánica Cuántica y operadores
- La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo
- Significado de la función de onda
- Apéndice: Conmutadores

Unidad III: La partícula en una caja

- Partícula en una caja 1D
- Partícula en una caja 3D
- Propiedades de la partícula en una caja

Práctica 1: Instalación de programas

- Instalación y configuración de ORCA, Avogadro 2 y Multiwfn

Unidad IV: Oscilador Armónico y Efecto Túnel

- Oscilador Armónico
- Vibración de las moléculas
- Efecto túnel

Práctica 2: Búsqueda conformacional con ORCA y Avogadro 2

- Exploración de conformaciones moleculares y superficie de energía potencial

Unidad V: Momento Angular

- Momento Angular

Unidad VI: Átomo Hidrogenoide

- El átomo hidrogenoide

Unidad VII: Rotor Rígido

- El rotor rígido

Unidad VIII: Tabla periódica

- Energía de ionización y afinidad electrónica

Unidad IX: Átomos Multielectrónicos

- Átomos multielectrónicos

Unidad X: Métodos Aproximados

- Método variacional
- Introducción a Hartree-Fock como puente al curso de Química Cuántica Aplicada

Práctica 3: Cálculos computacionales con ORCA

- Optimización de geometría
- Cálculo de frecuencias vibracionales
- Obtención e interpretación del espectro IR (molécula de ejemplo: cafeína e ibuprofeno)

- 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 y simular casos.
- 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>
2. Envía el comprobante de pago a ventas@pharbiois.com con el asunto “química_cuántica_fundamental PHC16” (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.