

Molecular Simulation

**HIGH SPECIALIZATION MASTER'S DEGREE IN PLASTICS AND
RUBBER**

UNIVERSIDAD INTERNACIONAL MENÉNDEZ PELAYO

This document can be used as reference documentation of this subject for the application for recognition of credits in other study programmes. For its full effect, it should be stamped by UIMP Student's Office.



GENERAL DATA

Name

Molecular Simulation

Code

100507

Academic year

2016-17

Degree

[HIGH SPECIALIZATION MASTER'S DEGREE IN PLASTICS AND RUBBER](#)

ECTS Credits

2

Type

MANDATORY

Duration

Cuatrimestral

Language

FACULTY

Coordinator/s

González de la Campa, José

Profesor de Investigación

Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros (ICTP)

Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)

Lecturers

Lozano López, Ángel E.

Investigador Científico

Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros (ICTP)

Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)

SCHEDULE

Timetable

28/02/2017

16:00 - 18:00

Tema 1: Introducción a la simulación molecular y la química computacional. Métodos de química computacional

José González de la Campa

Profesor de Investigación
Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros (ICTP)
Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)

06/03/2017

18:00 - 20:00

Tema 3: Métodos mecano-cuánticos: Métodos semiempíricos, Métodos ab- initio, Métodos DFT, Métodos mixtos: MM-QM

Ángel E. Lozano López

Investigador Científico
Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros (ICTP)
Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)

07/03/2017

16:00 - 20:00

Prácticas: Manejo de programas de simulación (1)

Ángel E. Lozano López

Investigador Científico
Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros (ICTP)
Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)

08/03/2017

16:00 - 18:00

Tema 4: Aplicaciones: Aplicación de la Química Computacional al diseño de nuevos monómeros, polímeros y sistemas catalíticos. Determinación teórica de la reactividad en procesos de polimerización

Ángel E. Lozano López

Investigador Científico
Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros (ICTP)
Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)

13/03/2017

16:00 - 18:00

Práctica: Mecánica molecular y dinámica molecular

José González de la Campa

Profesor de Investigación
Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros (ICTP)
Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)

14/03/2017

10:00 - 14:00

Prácticas: Manejo de programas de simulación (1)

José González de la Campa

Profesor de Investigación
Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros (ICTP)
Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)

15/03/2017

18:00 - 20:00

Tema 2: Métodos clásicos: Mecánica molecular. Campos de fuerza. Dinámica Molecular.
Determinación teórica de las propiedades de sistemas macromoleculares

José González de la Campa

Profesor de Investigación
Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros (ICTP)
Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)

31/03/2017

16:00 - 18:00

Examen

Ángel E. Lozano López

Investigador Científico
Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros (ICTP)
Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)