

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

2017-18

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

20/02/2018

18:00 - 20:00

Tema 1: Introducción a la Simulación Molecular y a la Química Computacional. Métodos clásicos: Mecánica Molecular. Campos de fuerzas. Dinámica Molecular.

José González de la Campa

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

26/02/2018

16:00 - 18:00

Tema 2: Teoría de métodos mecano-cuánticos. Métodos semiempíricos. Métodos ab.inicio. Métodos DFT. Métodos mixtos:MM-QM. Teoría de métodos mecano-cuánticos: Estudio de reacciones por métodos mecano-cuánticos.

José González de la Campa

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

01/03/2018

10:00 - 14:00

Práctica.- Manejo de programas de simulación

José González de la Campa

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

05/03/2018

16:00 - 18:00

Tema 3.- Determinación teórica de las propiedades de sistemas macromoleculares mediante métodos mecano-cuánticos

José González de la Campa

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

12/03/2018

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 formación de reacciones SEAr aromática mediante métodos de simulación molecular. Principales limitaciones del uso de la Química computacional en Polímeros. Programas comerciales para simulación molecular. Aplicación mediante el programa HyperChem.

Ángel E. Lozano López

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

14/03/2018

18:00 - 20:00

Tema 5.- Programas comerciales para simulación molecular. Aplicaciones del programa Materials Studio

José González de la Campa

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

21/03/2018

16:00 - 20:00

Práctica: Mecánica molecular y Dinámica molecular//Métodos mecanocuánticos

Ángel E. Lozano López

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

06/04/2018

10:00 - 12:00

Evaluación asignatura

Ángel E. Lozano López

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