Molecular Simulation

HIGH SPECIALIZATION MASTER'S DEGREE IN PLASTICS AND RUBBER

UNIVERSIDAD INTERNACIONAL MENÉNDEZ PELAYO

Másteres Universitarios

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

2019-20

Degree

HIGH SPECIALIZATION MASTER'S DEGREE IN PLASTICS AND RUBBER

ECTS Credits

2

Type

MANDATORY

Duration

Cuatrimestral

Language

FACULTY

Coordinator/s

Lozano López, Ángel E.

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

Lecturers

Ramos Díaz, Francisco Javier

Científico Titular
Instituto de Estructura de la Materia (IEM)
Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)

SCHEDULE

Timetable

25/02/2020

18:00 - 20:00

Tema 1. Introdución a los métodos de simulación y modelado molecular. Dinámica Molecular en materiales polímeros

Ángel E. Lozano López

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

27/02/2020

18:00 - 19:00

Tema 2. Introdución a los métodos de simulación y modelado molecular. Uso de métodos mecano-cuánticos en la determinación de la reactividad química; compuestos en estado fundamental (spin 1)

Francisco Javier Ramos Díaz

Científico Titular
Instituto de Estructura de la Materia (IEM)
Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)

19:00 - 20:00

Tema 3. Introdución a los métodos de simulación y modelado molecular. Uso de métodos mecano-cuánticos en la determinación de la reactividad química; radicales (spin 2)

Francisco Javier Ramos Díaz

Científico Titular
Instituto de Estructura de la Materia (IEM)
Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)

02/03/2020

16:00 - 18:00

Introducción a la simulación molecular: Dinámica molecular y multiescala

Francisco Javier Ramos Díaz

Científico Titular
Instituto de Estructura de la Materia (IEM)
Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)

18/03/2020

17:00 - 19:00

Introducción a la simulación molecular: Dinámica molecular

Francisco Javier Ramos Díaz

Científico Titular
Instituto de Estructura de la Materia (IEM)
Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)

20/03/2020

17:00 - 19:00

Práctica: Simulación Molecular

Francisco Javier Ramos Díaz

Científico Titular
Instituto de Estructura de la Materia (IEM)

Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)

23/03/2020

18:00 - 19:00

Prácticas: Modulos de Materials Studio (Dmol3 y VAMP)

Francisco Javier Ramos Díaz

Científico Titular
Instituto de Estructura de la Materia (IEM)
Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)