

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

2020-21

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

22/02/2021

18:00 - 20:00

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

Francisco Javier Ramos Díaz

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

23/02/2021

16:00 - 18:00

Tema 2. Introducción 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)

25/02/2021

16:00 - 20:00

Práctica: Simulación molecular

Francisco Javier Ramos Díaz

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

01/03/2021

16:00 - 18:00

Tema 3. Introducción 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)

03/03/2021

16:00 - 20:00

Práctica: 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)

04/03/2021

16:00 - 20:00

Práctica Dinámica molecular

Ángel E. Lozano López

Investigador Científico

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

09/04/2021

12:00 - 14:00

Evaluación asignatura

Ángel E. Lozano López

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