

# 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

2023-24

### 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

04/03/2024

17:00 - 19:00

Tema 1: Instalación y manejo básico de software usado en simulación molecular

Francisco Javier Ramos Díaz

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

05/03/2024

15:00 - 17:00

Tema 2: Introducción a la Simulación Molecular con métodos atomísticos clásicos

Francisco Javier Ramos Díaz

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

07/03/2024

15:00 - 17:00

Tema 3: Introducción teórico-práctica a los métodos mecano-cuánticos

Ángel E. Lozano López

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

08/03/2024

17:00 - 19:00

Tema 4: Aplicaciones: Determinación teórica de la reactividad en procesos de formación de reacciones SEAr aromática mediante métodos de simulación molecular.

Ángel E. Lozano López

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

11/03/2024

17:00 - 19:00

Práctica 2: Determinación de la reactividad en moléculas orgánicas 2 alumnos por ordenador resolviendo casos reales de simulación. Evaluación continua del alumno

Ángel E. Lozano López

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

12/03/2024

15:00 - 19:00

Tema 5: Aplicaciones: introducción a las simulaciones en la mesoescala y multiescala

Francisco Javier Ramos Díaz

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

20/03/2024

15:00 - 19:00

Práctica 1: Modelización atómica y en la mesoescala de un sistema polimérico usando Materials Studio(MS) : Cada alumno realizará una serie de simulaciones prácticas con MS.  
Evaluación continua del alumno

Francisco Javier Ramos Díaz

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

01/04/2024

15:00 - 17:00

Evaluación: determinación teórica de la reactividad

Ángel E. Lozano López

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