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

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 atomística 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)