

Registro RENIECYT-CONAHCYT: 2000001

Curso: Métodos de Estructura Electrónica.

100% online: asincrónico en

<https://www.classroom.google.com/> y <https://pharbiois.milaulas.com/>



Inicia: 30 de septiembre del 2024

Profesor: Dra Brenda Manzanilla Viveros, SNI-1

<https://www.linkedin.com/in/brenda-manzanilla-a3155a6a/?originalSubdomain=mx>

Duración: 24 horas

Acerca del curso

Aprender sobre la estructura electrónica atómica y molecular junto con las bases de los métodos aproximados. Además, el estudiante aprenderá las bases para realizar cálculos computacionales, determinar geometrías, energías electrónicas y propiedades moleculares.

PROGRAMA

1. La estructura del Átomo
2. Antecedentes de la Mecánica Cuántica
3. La ecuación de Schrödinger
4. Átomos Multielectrónicos
5. Aproximación de Hartree-Fock
6. Aproximación de Born-Oppenheimer
7. Superficie de Energía Potencial
8. Métodos Ab initio
9. Métodos Semi empíricos
10. Teoría Funcionales de la Densidad
11. Mecánica Molecular
12. Dinámica Molecular y Monte Carlo

Actividades complementarias:

Práctica 1: *Optimización de geometría*

El estudiante aprenderá los comandos básicos de entrada para obtener geometrías, frecuencias vibracionales de la molécula de estudio y realizar análisis conformacional. Se probarán distintos métodos y bases para comparar los resultados. Se usarán visualizadores gratuitos como Avogadro y VMD para visualizar los resultados. Para los cálculos se ocuparan los programas: Gamess, Avogadro y multiwfn.

Práctica 2: *Cálculo de propiedades moleculares*

El estudiante aprenderá a calcular distintos modelos de cargas moleculares, momentos dipolares, potencial electrostático y orbitales frontera HOMO y

Pharmaceutical and Biotechnological Innovation-Services SAS de CV



LUMO que servirán para realizar la reacción de Diels- Alder. Por último, obtendrán descriptores de la reactividad química de la Teoría de Funcionales de la Densidad Conceptual como son energía de ionización y afinidad electrónica y dureza para evaluar el comportamiento químico de una molécula.

Práctica 3: Cálculo de entalpía de formación

El estudiante aprenderá a calcular la entalpía de formación de una molécula.

COSTO, \$ **1,299.00 MXM** (aprox 65 USD). Para inscribirse hacer pago a la cuenta CLABE SANTANDER: 0141-8065-5079-1315-04, a nombre de Pharmaceutical and Biotechnological Innovation Services SAS De CV. El comprobante se manda al correo: pharmaceuticalandbiotechnology@gmail.com. También puede pagar en línea: <https://bit.ly/3rbQ1OU> por **PayPal**, MERCADO PAGO o por Stripe (TDD, TDC, OXXO, etc). Descuentos 10 % estudiantes de licenciatura y haber tomado 2 o más cursos y/o diplomados en pharbiois.com, 5 % estudiantes de Posgrado y posdocs, haber tomado un curso y/o diplomado en pharbios.com, profesores de tiempo parcial.

OPINIONES DEL CURSO

Fue un curso muy completo.

El curso fue 100% claro

La Dra explicó muy claramente los temas