

Presentación

La Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa y la Universidad Autónoma del Estado de México lo invitan al **Primer Simposio sobre Simulación Molecular: desde fluidos simples hasta proteínas**, el cual se llevará a cabo el 11 de diciembre del 2009 en la sala Cuicacalli.

Una amplia gama de problemas en el campo de las ciencias exactas y las ingenierías pueden ser explorados y comprendidos desde un nivel molecular. Éstos incluyen, entre otros, la termodinámica del comportamiento entre fases, la mecánica estadística de interfases, microestructura en sistemas complejos como agua-aceite-surfactante, la predicción de propiedades de transporte y diseño de materiales, etc. El crecimiento explosivo de poderosos equipos de supercómputo durante las dos últimas décadas ha conducido al desarrollo de técnicas de simulación molecular de gran escala con el propósito de validar resultados de modelos teóricos y reproducir información experimental.

El objetivo de este simposio es promover el campo de la simulación molecular entre la comunidad mexicana y conocer de cerca el estado del arte tanto en los métodos como en sus aplicaciones. Las conferencias serán dictadas por expertos mexicanos en teoría de líquidos y en los métodos clásicos de Dinámica Molecular y Monte Carlo.

El simposio está dirigido a estudiantes tanto de licenciatura como de posgrado, así como a investigadores de la academia y la industria.

Ponentes

- **Fernando del Río.**
Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa
- **Ana Laura Benavides.**
Universidad de Guanajuato
- **Pedro Orea.**
Instituto Mexicano del Petróleo
- **Gustavo Chapela.**
Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa
- **Minerva González-Melchor.**
Benemérita Universidad Autónoma de Puebla
- **Jorge López-Lemus.**
Universidad Autónoma del Estado de México
- **José Alejandro.**
Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa
- **Gerardo Odriozola.**
Instituto Mexicano del Petróleo
- **Humberto Saint-Martín**
Universidad Nacional Autónoma de México
- **Roberto López-Rendón.**
Universidad Autónoma del Estado de México
- **Gerardo Pérez.**
Universidad Autónoma Metropolitana-Cuajimalpa

Pláticas

- 1.- **Las simulaciones que me gustaría hacer, o que alguien hiciera**
Fernando del Río
- 2.- **Fluidos de un solo componente que presentan varios puntos críticos y/o anomalías del tipo de las que presenta el agua.**
Ana Laura Benavides
- 3.- **La ley de estados correspondientes de fluidos modelos atractivos.**
Pedro Orea
- 4.- **Mancuernas vibrantes con pozo cuadrado**
Gustavo Chapela
- 5.- **Simulación Molecular de fluidos iónicos, polielectrolitos y fluidos Gay-Berne.**
Minerva González-Melchor
- 6.- **Hidratos de metano en la región de transición.**
Jorge López-Lemus
- 7.- **Desarrollar y/o correr programas de simulación molecular.**
José Alejandro
- 8.- **Entropía del solvente y el autoensamblaje macromolecular**
Gerardo Odriozola
- 9.- **El presente y el posible futuro del modelado de las moléculas de agua**
Humberto Saint-Martin
- 10.- **Estudio de la dinámica funcional lenta de la proteína Pin1-WW por dinámica molecular y resonancia magnética nuclear**
Roberto López-Rendón
- 11.- **Explorando el papel de la termoestabilidad de proteínas mediante simulaciones de dinámica molecular**
Gerardo Pérez

Organizadores

Roberto López-Rendón
Universidad Autónoma del
Estado de México
Email: rlopezre@gmail.com
Tel.: 55-5804 4675 Ext 110

José Alejandro
Universidad Autónoma
Metropolitana-Iztapalapa
Email: jra@xanum.uam.mx
Tel.: 55-5804 4675 Ext 105

Tópicos

- **Métodos de Dinámica Molecular y Monte Carlo**
- **Diagrama de Fases y Propiedades Críticas**
- **Soluciones Iónicas**
- **Ecuaciones de Estado**
- **Fluidos en Interfases**
- **Biomoléculas**

Primer Simposio sobre Simulación Molecular

Desde Fluidos Simples hasta Proteínas

11 de diciembre de 2009

Sala Cuicacalli

Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa

<http://quimica.izt.uam.mx/ssm09>

Organizadores



Universidad Autónoma
Metropolitana-Iztapalapa



Universidad Autónoma
del Estado de México

Patrocinadores

