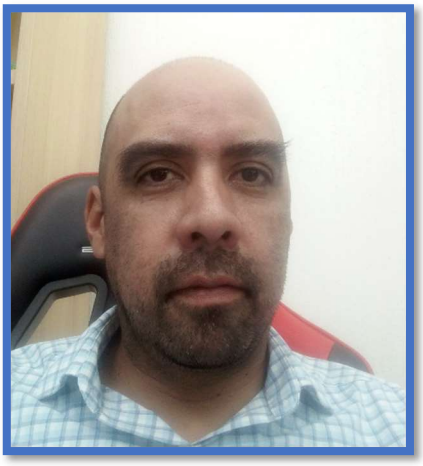
Condensed Matter and Nanotechnology Division
XVI NANOTECH CONGRESS
May 28-31, 2024, GUADALAJARA, MEXICO

Simulación molecular de moléculas polares y tensoactivos



Dr. José Guillermo Méndez

Dr. Iván Guillén Escamilla Bermúdez

Institución
Centro Universitario de los Valles, Universidad de Guadalajara

Temario del curso
Sesión 1 (80 min)
Dinámica molecular y comandos Unix
Sesión 2 (80 min)
Simulación del compuesto Dimetilsulfóxido (DMSO)
Sesión 3 (80 min)
Obtención de solubilidad de una mezcla de compuestos
Sesión 4 (60 min)
Cálculo del radio de una micela de Dodecilsulfato sódico (SDS)

Requerimientos:
Los requerimientos del curso son los siguientes:

1) contar con laptop con windows, linux o mac, pueden ser dos asistentes por equipo de computo.

2) Como se trabajará en ambiente unix, se requiere de una maquina virtual en linux solo si su máquina tiene sistema operativo windows, se anexa tutorial, ver tutorial_virtual de la liga que se muestra al final del texto.

3) Se requiere la instalación de varios software, gromacs, vmd, avogadro, xmgrace, se anexa tutorial para

su instalación, ver tutorial_gromacs de la siguiente liga que esta la final del texto.

https://drive.google.com/file/d/1aSClmYSgc2Jr0Hs7h0fcFh4SkOXxyymn/view?usp=sharing

Dudas o preguntas con la instalación de la máquina virtual a los correos, iguillen1978@gmail.com o ivan.guillen@valles.udg.mx, respecto a los softwares se pueden dirigir a los correos anteriores y también al correo jose.bermudez@academicos.udg.mx.