

Modelado Computacional de Nanomateriales para Biosensores. Curso Híbrido y Teórico-Práctico. Teórico- Lunes 9:30-14:00 h, Martes 9:00 a 11:00 h, Práctico vía zoom - Martes 17-18:30h

Dra. Ana Elizabeth Torres Hernández. ICAT - UNAM.

En el curso se presenta una introducción a la Química Computacional orientada a la realización de cálculos teóricos de interés en Nanomateriales para Biosensores. Se abordarán algunos aspectos teóricos introductorios necesarios para realizar cálculos de energía de punto simple, optimización de geometría, termoquímica, energía de adsorción y algunas propiedades electrónicas como análisis de la densidad de estados. El curso será teórico-práctico con una dinámica de trabajo activa utilizando un aula virtual. Se utilizarán programas de acceso libre preferentemente.

Programa del curso

- Introducción al modelado computacional de materiales y nanomateriales (1.5 horas)
- Construcción del modelo y optimización de la geometría. (1.5 horas)
- Modelado de procesos de adsorción en nanomateriales. (1.5 horas)
- Cálculo de propiedades electrónicas y propiedades de interés en el diseño de biosensores (2 horas)
- Uso de herramientas computacionales para el modelado computacional de nanomateriales para biosensores (Práctico, vía zoom, 1.5h)

Requisitos

Ser alumno@ regular de sexto semestre o semestres más avanzados de las carreras de Química, Ingenierías y Física o carreras afines, o ser estudiante de Posgrado. Haber cursado algunas asignaturas afines a la Química Cuántica y/o Química de Materiales. No es necesario tener conocimiento de algún lenguaje de programación o del sistema operativo Linux. Se requiere contar con una computadora para realizar la sesión práctica que será vía remota. Se registrará la asistencia al curso y se valorará su acreditación con un ejercicio práctico.

Bibliografía

- 1) Lee, J. G. *Computational Materials Science : An Introduction*, Second edition.; (Firm), P., Ed.; CRC Press, Taylor & Francis: Boca Raton, 2017.
- 2) Front Matter. In *Computational Chemistry of Solid State Materials*; 2005; pp I–VI. <https://doi.org/10.1002/9783527612277.fmatter>.

- 3) Giustino F. (2014). Materials modelling using density functional theory: properties and predictions (1st ed.). Oxford University Press.