

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
FACULTAD DE QUÍMICA

PROGRAMAS DE ESTUDIO
OCTAVO O NOVENO SEMESTRE

Asignatura INTRODUCCIÓN A LA SIMULACIÓN MOLECULAR	Ciclo TERMINAL Y DE ESPECIALIZACIÓN	Campo de Estudio FISICOQUÍMICA	Departamento FISICOQUÍMICA
--	--	--	--------------------------------------

HORAS/SEMANA/SEMESTRE

OPTATIVA	Clave 0083	TEORÍA 3 h/48h	PRÁCTICA 0 h	CRÉDITOS 6
-----------------	-------------------	-----------------------	---------------------	-------------------

Tipo de asignatura:	TEÓRICO-PRÁCTICA
Modalidad de la asignatura:	CURSO

ASIGNATURA PRECEDENTE: Seriación indicativa con Introducción a la Termodinámica Estadística.

ASIGNATURA SUBSECUENTE: Ninguna

OBJETIVO(S):

Introducir a los estudiantes a los conceptos básicos de los métodos de simulación molecular. Descripción y análisis de potenciales intermoleculares empíricos y ab initio. Conocer el Método de Montecarlo y la dinámica molecular. Aplicación de estos métodos para la determinación de las propiedades macroscópicas de la materia, y su relación con el potencial intermolecular utilizado para la simulación molecular.

UNIDADES
TEMÁTICAS

NÚMERO DE HORAS POR UNIDAD	UNIDAD
8T 8h	1. INTRODUCCIÓN Y REVISIÓN DE CONCEPTOS 1.1. Mecánica clásica 1.2. Termodinámica estadística 1.3. Química Cuántica
6T 6h	2. POTENCIALES DE INTERACCIÓN 2.1. Fuerzas de dispersión 2.2. Fuerzas electrostáticas 2.3. Tratamiento de fuerzas de largo alcance
10T 10h	3. TÉCNICAS DE SIMULACIÓN 3.1. Condiciones periódicas a la frontera 3.2. Promedios estadísticos 3.3. Fluctuaciones 3.4. Propiedades estructurales
12T 12h	4. SIMULACIÓN MONTECARLO 4.1. Muestreo de importancia 4.2. Generación de configuraciones 4.3. Aplicaciones
12T 12h	5. DINÁMICA MOLECULAR 5.1. Ecuaciones de movimiento 5.2. Propiedades dinámica 5.3. Funciones de correlación 5.4. Aplicaciones

TOTAL 48T-48H

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

1. Allen, M.P.& Tildesley, D.J. **Computer Simulation in Chemical Physics**, Springer Science & Business, Media, 2013.
2. Gould, H &Tobochnik, J, **An Introduction to Computer Simulation Methods: Applications to Physical Systems**. Pearson 2006
3. Leach,A.R., **Molecular Modelling.**, 2da ED., Prentice Hall , 2001
4. Frenkel, D.,& Smit, B., **Understanding Molecular Simulation, Second Edition: From Algorithms to Applications** Academic Press, 2002
5. Jensen, F., **Introduction to Computational Chemistry**, Wiley 2007.

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

1. Schlick, T., *Molecular Modelling and Simulation*, Springer Verlag, 2002.

SUGERENCIAS DIDÁCTICAS

Exposición del profesor, seminarios impartidos por los alumnos, elaboración de un trabajo de investigación, discusión de artículos recientes de la literatura.

FORMA DE EVALUAR

Exámenes, tareas, exposiciones, participación en clase.

PERFIL PROFESIOGRÁFICO DE QUIENES IMPARTEN LA ASIGNATURA

Profesores activos en investigación en el área, con estudios de posgrado en Físicoquímica.