

**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO**  
**FACULTAD DE QUÍMICA**

**PROGRAMAS DE ESTUDIO**  
**OCTAVO O NOVENO SEMESTRE**

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

**HORAS/SEMANA/SEMESTRE**

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

<b>Tipo de asignatura:</b>	<b>TEÓRICO-PRÁCTICA</b>
<b>Modalidad de la asignatura:</b>	<b>CURSO</b>

**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**

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