

UNIDAD: IZTAPALAPA		DIVISIÓN CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA	
NIVEL: LICENCIATURA		EN QUÍMICA	
CLAVE: 2141120	UNIDAD DE ENSEÑANZA - APRENDIZAJE: MÉTODOS DE SIMULACIÓN MOLECULAR		TRIM: VIII-XII
HORAS TEORÍA: 3	SERIACIÓN 2141086		CRÉDITOS: 9
HORAS PRÁCTICA: 3			OPT/OBL: OPT.

OBJETIVO(S):

GENERALES

Que al final del curso el alumno sea capaz de:

- Entender las distintas contribuciones de las interacciones en un campo de fuerzas en sistemas de muchas moléculas.
- Comprender los aspectos teóricos y prácticos de la simulación molecular.
- Distinguir las diferencias entre Dinámica Molecular (DM) y Monte Carlo (MC).
- Relacionar las propiedades físicas con las posiciones y velocidades de los átomos.
- Usar programas de simulación para la obtención de propiedades en condiciones similares a las experimentales o en condiciones donde el experimento no es accesible.

ESPECÍFICOS

Que al final del curso el alumno sea capaz de:

- Identificar las distintas contribuciones del potencial de interacción en un campo de fuerzas.
- Derivar el potencial para obtener las fuerzas de cada contribución.
- Comprender la estructura de un programa de DM y otro de MC en sistemas con interacciones continuas de corto alcance (Lennard-Jones).
- Conocer los distintos métodos para controlar temperatura y presión.
- Aplicar programas de DM y MC a sistemas moleculares usando campos de fuerzas.
- Desarrollar rutinas de análisis de resultados dadas las posiciones y velocidades.

CONTENIDO SINTÉTICO:

Teoría

1. Interacciones moleculares

- 1.1 Modelos de potencial y fuerzas intra e intermolecular (campos de fuerzas):
- 1.2 Distancias de enlace, ángulos de enlace y ángulos de torsión.
- 1.3 Lennard-Jones y Coulomb. Sumas de Ewald y método PME.

NOMBRE DEL PLAN LICENCIATURA EN QUÍMICA		2/3
CLAVE 2141120	UNIDAD DE DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE MÉTODOS DE SIMULACIÓN MOLECULAR	

2. Dinámica molecular

- 2.1 Solución numérica de las ecuaciones de movimiento. Métodos de diferencias finitas. Algoritmo de Verlet.
- 2.2 Temperatura constante por medio de reescalar velocidades.
- 2.3 Operadores de Liouville y algoritmo de Verlet con velocidades.
- 2.4 Métodos para controlar temperatura y presión.
- 2.5 Cadenas de termostatos y barostatos de Nosé-Hoover.
- 2.6 Moléculas rígidas y algoritmo SHAKE/RATTLE.

3. Monte Carlo

- 3.1 Métodos de integración por Monte Carlo.
- 3.2 Probabilidad y funciones de partición en distintos colectivos: Canónico, isotérmico-isobárico y gran canónico.
- 3.3 Algoritmo de Metropolis.

Taller

1. Simulaciones numéricas en fluidos esféricos

- 1.1 Generar la configuración inicial (posiciones y velocidades).
- 1.2 Condiciones periódicas a la frontera y condición de mínima imagen.
- 1.3 Analizar un programa usando el potencial de Lennard-Jones:
- 1.4 DM en sistemas aislados (N, V, E) y a temperatura y presión constante (N, P, T).
- 1.5 MC a temperatura y presión constantes.
- 1.6 Cuantificar los errores de truncamiento del potencial y el efecto de tamaño finito en las propiedades físicas.
- 1.7 Relacionar las fluctuaciones con propiedades físicas.
- 1.8 Examinar en un programa de DM y MC el cálculo de propiedades: termodinámicas (temperatura, presión, potencial químico, etc.), estructura (función de distribución radial, perfil de densidad, etc.) y transporte (difusión y viscosidad)
- 1.9 Aplicar el programa de DM y MC para obtener propiedades físicas en distintas fases.

2. Simulaciones con programas del dominio público

- 2.1 Identificar los campos de fuerzas y los algoritmos que generan la trayectoria de los átomos en un programa de DM o MC.
- 2.2 Comprender las variables de entrada y propiedades calculadas en la simulación.
- 2.3 Proyectos de investigación sobre sistemas en una o varias fases con uno o varios componentes: Agua, alcoholes, aminas, hidrocarburos, electrolitos, zeolitas, adsorción en superficies.

NOMBRE DEL PLAN LICENCIATURA EN QUÍMICA		3/3
CLAVE 2141120	UNIDAD DE DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE MÉTODOS DE SIMULACIÓN MOLECULAR	

MODALIDADES DE CONDUCCIÓN DEL PROCESO DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE:

- Clase de teoría en forma de conferencia magistral.
- Seminarios impartidos por los alumnos de algunos temas del curso.
- En las sesiones de presentación se discute el alcance y limitación del programa computacional empleado, así como ejemplos demostrativos del mismo.
- En las sesiones de taller los alumnos desarrollarán experimentos dirigidos por el profesor.
- En cada semana se impartirán teoría y taller simultáneamente.

MODALIDADES DE EVALUACIÓN:

Evaluación Global:

- Pruebas abiertas parciales (al menos dos).
- Reporte escrito y presentación oral de proyectos (al menos uno).
- Experimentos computacionales.
- Tareas periódicas.

El porcentaje de cada rubro será a criterio del profesor.

Evaluación de Recuperación:

- El curso no podrá acreditarse mediante una evaluación de recuperación.

BIBLIOGRAFÍA NECESARIA O RECOMENDABLE:

1. Allen, M.P., Tildesley. D.J., *Computer Simulations of Liquids*, Oxford University Press, 2002.
2. Artículos de investigación en revistas especializadas.
3. Leach, A., *Molecular Modeling: Principles and Applications*. (2nd Edition), 2001.
4. Smit. B., Frenkel. D., *Understanding molecular simulations*, Academic Press, 2001.
5. Programas de DM y Monte Carlo para el potencial de Lennard-Jones.
6. Programas de simulación molecular del dominio público: GROMACS, NAMD, DL_POLY.