

UNIVERSIDAD DE GUANAJUATO										
Nombre de la Unidad Académica:		División de Ciencias e Ingenierías								
Nombre del Programa Educativo:		Maestría en Ciencias Aplicadas								
Nombre de la Unidad de Aprendizaje:		Simulación Molecular I (Monte Carlo)					Clave:		SM-I	
Fecha de Elaboración:		09-Febrero-2012					Horas/Semana/Semestre			
Prerrequisitos						Teoría Presenciales		4		
Cursada y Aprobada:						Trabajo individual		7		
Cursada:						Créditos:		8		
Caracterización de la Unidad de Aprendizaje										
Por el tipo de conocimiento:		Disciplina	Formativa	Metodológica	X					
Por la dimensión del Conocimiento:		Básica	General	Profesional	X					
Por la Modalidad de Abordar el Conocimiento:		Curso	X	Taller	X	Laboratorio	Seminar			
Por el Carácter de la Unidad de Aprendizaje:		Obligatoria	Rekursable	Optativa	X	Selectiva	Acreditable			
Es Parte de un Tronco Común?		Sí	No	X						
Objetivos de la Unidad de Aprendizaje										
<p>Aplicar los conceptos, definiciones y herramientas adquiridos durante el curso a la solución numérica y computacional de problemas planteados en el marco de la Mecánica Estadística.</p> <p>Aprender a calcular propiedades termodinámicas, dinámicas y estructurales de sistemas macroscópicos a partir de sus contribuciones microscópicas.</p> <p>Aprender el uso de la Simulación Molecular como una poderosa herramienta para contrastar soluciones analíticas (teoría), resolver problemas que no tienen solución analítica y substituir datos experimentales cuando no se tienen ó son difíciles de adquirir. Explicar y predecir fenómenos fisicoquímicos con los conocimientos adquiridos.</p>										
Contribución de la Unidad de Aprendizaje al Logro del Perfil de Egreso										
Tener un manejo amplio de la Simulación Molecular como una herramienta para el cálculo de propiedades en diferentes tipos de sistemas.										
Nombre del Programa		Maestría en Ciencias Aplicadas		Nombre de la Unidad de Aprendizaje		Simulación Molecular I (Monte Carlo)		Clave: SM-I		
Tiempo Estimado Para el Logro de los Objetivos: 64 horas de clase					Criterios de Evaluación para Acreditar el Curso: Participación en clase, laboratorio, tareas y exámenes.					
Unidades y Objetos de Estudio		Objetivos Terminales	Productos de Aprendizaje	Actividades de Aprendizaje	Insumos Informativos	Actividad Evaluativa				
1. INTRODUCCION Y CONCEPTOS BASICOS EN SIMULACION MOLECULAR		Que el estudiante se familiarice con las bases que sustentan la simulación molecular y con el lenguaje y conceptos utilizados en la simulación molecular.	Conocimientos sobre los conceptos básicos de la simulación molecular.	Asistencia a clases. Participación en clases.	Bibliografía	Tareas y exámenes. Exposiciones en clase Desarrollo de proyectos Participación en clase Participación en discusiones grupales Autoevaluación y				
1.1. Introducción e historia de la Simulación Molecular										
1.2. Recordatorio de Mecánica Estadística										
1.2.1. Entropía y Temperatura										
1.2.2. Mecánica Estadística Clásica e										

<p>hipótesis ergódica</p> <p>1.3. Potenciales de interacción intermolecular</p> <p>1.4. Simulaciones usando el método Monte Carlo</p> <p>1.5. Cuestiones técnicas</p> <p>1.6. La caja de simulación</p> <p>1.6.1. Condiciones Periódicas de Contorno</p> <p>1.6.2. Condiciones de Mínima Imagen</p> <p>1.6.3. Correcciones de Largo Alcance</p> <p>1.6.4. Unidades Reducidas</p> <p>1.6.5. Haciendo promedios</p>				<p>coevaluación</p> <p>Portafolio de evidencias</p> <p>En caso de laboratorio: reportes de prácticas y bitácora</p>
<p>2. IMPLEMENTACION DE TU PRIMER CODIGO DE SIMULACION MC</p> <p>2.1. Algoritmo básico</p> <p>2.2. "input", "output"</p> <p>2.3. Movimientos MC ("trial moves")</p> <p>2.4. Configuración inicial "random" y en una malla</p> <p>2.5. Visualización</p> <p>2.6. Código en el colectivo NVT para un fluido de esferas duras</p> <p>2.6.1. Cálculo de energía total, "double check"</p> <p>2.7. Pasemos a un fluido Lennard-Jones</p>	<p>Que el estudiante aprenda las partes básicas de un código Monte Carlo.</p>	<p>Un código NVT para esferas duras y uno para un potencial Lennard-Jones.</p> <p>Un "snapshot" de una configuración inicial y final resultado de correr ambos códigos de simulación.</p>	<p>Asistencia a clases</p> <p>Participación en clases</p> <p>Programación e implementación de códigos.</p>	<p>Bibliografía</p> <p>Tareas y exámenes.</p> <p>Exposiciones en clase</p> <p>Desarrollo de proyectos</p> <p>Participación en clase</p> <p>Participación en discusiones grupales</p> <p>Autoevaluación y coevaluación</p> <p>Portafolio de evidencias</p> <p>En caso de laboratorio: reportes de prácticas y bitácora</p>
<p>3. CALCULO DE PROPIEDADES TERMODINAMICAS Y ESTRUCTURALES</p> <p>3.1. Función de distribución radial</p> <p>3.2. Cálculo de la presión (usando el virial)</p> <p>3.3. Cálculo de potencial químico utilizando el método de Widom</p>		<p>Subrutinas para calcular estas propiedades adaptadas a ambos códigos</p>	<p>Asistencia a clases</p> <p>Participación en clases</p> <p>Programación e implementación de códigos</p>	<p>Bibliografía</p> <p>Tareas y exámenes</p> <p>Exposiciones en clase</p> <p>Desarrollo de proyectos</p> <p>Participación en clase</p> <p>Participación en discusiones grupales</p> <p>Autoevaluación y coevaluación</p> <p>Portafolio de evidencias</p> <p>En caso de laboratorio: reportes de prácticas y bitácora</p>
<p>4. TRABAJANDO EN OTROS COLECTIVOS</p> <p>4.1. Microcanónico (NVE)</p> <p>4.2. Isobárico-isotérmico (NPT)</p> <p>4.3. Gran canónico (μVT)</p> <p>4.4. GEMC (equilibrio de fases)</p> <p>4.5. REMC (con reacción química)</p>		<p>Un código a elegir entre los 5 presentados</p>	<p>Asistencia a clases</p> <p>Participación en clases</p> <p>Programación e implementación</p>	<p>Bibliografía</p> <p>Tareas y exámenes</p> <p>Exposiciones en clase</p> <p>Desarrollo de proyectos</p> <p>Participación en clase</p> <p>Participación en discusiones grupales</p> <p>Autoevaluación y</p>

			de códigos		coevaluación de evidencias En caso de laboratorio: reportes de prácticas y bitácora
5. TECNICAS AVANZADAS 5.1. Interacciones de largo alcance 5.1.1. "Reaction field" 5.1.2. Sumas de Ewald 5.1.3. Método de Wolf 5.2. Monte Carlo "biased"		Un código NVT para una solución de electrolito o algo equivalente, dependiendo de los intereses de la tesis del estudiante	Asistencia a clases Participación en clases Programación e implementación de códigos	Bibliografía	Tareas y exámenes Exposiciones en clase Desarrollo de proyectos Participación en clase Participación en discusiones grupales Autoevaluación y coevaluación Portafolio de evidencias En caso de laboratorio: reportes de prácticas y bitácora

Fuentes de Información

Bibliografía Básica:	Bibliografía Complementaria:
<ol style="list-style-type: none"> 1. Frenkel, D.; Smit, B. Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications, 2nd ed.; Academic Press: U. S. A., 2002. 2. Allen, M. P.; Tildesley, D. J. Computer Simulation of Liquids; Clarendon Press: Oxford, 1987. 3. McQuarrie, D. A. Statistical Mechanics, University Science Books: USA, 2000. 4. Prausnitz, J. M., Lichtenthaler, R. N., Gomes de Azevedo, E. Termodinámica Molecular de los Equilibrios de Fases, 3ª ed.; Prentice Hall: Madrid, 2000. 	<p>Otras Fuentes de Información:</p> <ol style="list-style-type: none"> 5. http://www.ccp5.ac.uk/ 6. http://www.princeton.edu/che/people/faculty/panagiotopoulos/group/ 7. http://webbook.nist.gov/chemistry/
	Artículos de investigación se irán dando sobre la marcha.