

Introducción a las Simulaciones Computacionales Moleculares

Requisitos de la materia: Métodos Numéricos, Métodos Matemáticos I y II, Física Estadística.

Descripción de la asignatura: Este curso es planteado para introducir al estudiante en el área de las simulaciones computacionales, en especial, las simulaciones moleculares. El principal esfuerzo estará dedicado a explicar la física que existe detrás de una “receta”, “código” en una simulación. Esto dará al estudiante el entendimiento físico esencial para acceder en el futuro a métodos computacionales más complejos. Como el curso es introductorio, nos restringiremos solamente a modelos de sistemas en, o cerca del equilibrio con simulaciones clásicas de muchas partículas. De igual forma, no se discutirán todos los aspectos que involucra una simulación computacional para no hacer tan abstracto el contenido. Dos tópicos serán discutidos en detalle, las técnicas para estudiar transiciones de fase de primer-orden y varios aspectos del Método de base-configuracional de Monte Carlo. Estos tópicos serán una gran plataforma para, al final, concluir con la técnica de simulación llamada “Dinámica Molecular”.

Índice Temático:

1. **Elementos Matemáticos Básicos:** Entropía y Temperatura. Mecánica Clásica Estadística.
2. **Simulaciones de Monte Carlo:** El Método Montecarlo. Un Algoritmo Básico de Monte Carlo. Movimientos Prueba.
3. **Simulaciones de Dinámica Molecular:** La Idea de la Técnica. Un Programa. Ecuación de Movimiento. Experimentos Computacionales. Aplicaciones.
4. **Dinámica Molecular en Varios Ensamblajes:** Dinámica Molecular a Temperatura Constante. Dinámica Molecular a Presión Constante.

Bibliografía:

1. Daan Frenkel & Berend Smit, “*Understanding Molecular Simulations from Algorithms to Applications*”, Second Edition. Academic Press.
2. Diter W. Heermann, “*Computer Simulation Method in Theoretical Physics*”, Second Edition. Springer-Verlag.

Planeación Educativa

Competencias a desarrollar:

Generales:

1. Capacidad de aplicar los conocimientos en la práctica
2. Conocimientos sobre el área de estudio y la profesión
3. Capacidad de investigación
4. Habilidad para trabajar en forma autónoma
5. Habilidades para buscar, procesar y analizar información procedente de fuentes diversas

Específicas:

1. Aplicar el conocimiento teórico de la física a la realización e interpretación de experimentos llamados computacionales.
2. Demostrar una comprensión profunda de los conceptos fundamentales y principios de la física.
3. Demostrar hábitos de trabajo necesarios para el desarrollo de la profesión tales como el trabajo en equipo, el rigor científico, el autoaprendizaje y la persistencia.
4. Comunicar conceptos y resultados científicos en lenguaje oral y escrito ante sus pares, y en situaciones de enseñanza y de divulgación.

Resultados del aprendizaje	Actividades educativas	TETE	Evaluación
Elementos Matemáticos Básicos	Teóricas, Practicas (13.5T+4.5P= 18 hrs.) Autoestudio	18 9	1-er examen parcial
Simulaciones de Monte Carlo	Teóricas, Practicas (22.5T+7.5P= 9 hrs.) Autoestudio	30 15	2-Do examen parcial
Simulaciones de Dinámica Molecular	Teóricas, Practicas (18T+6P= 9 hrs.) Autoestudio	24 12	3-er examen parcial
Dinámica Molecular en Varios Ensamblajes	Teóricas, Practicas (18T+6P= 9 hrs.) Autoestudio	24 12	4-to examen parcial

Total de horas de trabajo del estudiante: $(72 + 24) = 96$ horas presenciales + (48) horas de autoestudio = 144 hrs.

Número de Créditos: 8