

UNIDAD IZTAPALAPA		DIVISION CIENCIAS BASICAS E INGENIERIA		1 / 4	
NOMBRE DEL PLAN LICENCIATURA EN QUIMICA					
CLAVE	UNIDAD DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE METODOS DE SIMULACION MOLECULAR			CRED.	9
2141120				TIPO	OPT.
H. TEOR. 3.0	SERIACION			TRIM.	
H. PRAC. 3.0	2141086			VIII-XII	

OBJETIVO(S) :

Objetivos Generales:

Que al final de la UEA 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.

Objetivos Específicos:

Que al final de la UEA 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.



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

APROBADO POR EL COLEGIO
ACADEMICO
EN SU SESION NUM. 343

EL SECRETARIO DEL COLEGIO

[Handwritten signature]

CLAVE 2141120

METODOS DE SIMULACION MOLECULAR

CONTENIDO SINTETICO:

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.
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.)



UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

APROBADO POR EL COLEGIO
ACADEMICO
EN SU SESION NUM. 343~~EL SECRETARIO DEL COLEGIO~~
9/12

NOMBRE DEL PLAN LICENCIATURA EN QUIMICA		3/ 4
CLAVE 2141120	METODOS DE SIMULACION MOLECULAR	

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.

MODALIDADES DE CONDUCCION DEL PROCESO DE ENSEÑANZA-APRENDIZAJE:

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

MODALIDADES DE EVALUACION:

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.



UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

APROBADO POR EL COLEGIO
ACADEMICO
EN SU SESION NUM. 343

~~EL SECRETARIO DEL COLEGIO~~
[Handwritten signature]

NOMBRE DEL PLAN LICENCIATURA EN QUIMICA

4/ 4

CLAVE 2141120

METODOS DE SIMULACION MOLECULAR

BIBLIOGRAFIA 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.



UNIVERSIDAD AUTONOMA METROPOLITANA

APROBADO POR EL COLEGIO
ACADEMICO
EN SU SESION NUM. 343

EL SECRETARIO DEL COLEGIO

[Handwritten signature]