

## Simulación Molecular

---

Número de créditos: 10

Horas a la semana: 10

Teoría: 6

Práctica: 4

Autoestudio: 6

Requisitos: Ninguno

Clave: AFE-10

Asignatura: Optativa

Materia asociada a la Línea de investigación: OF

---

Descripción de la asignatura: La materia blanda es una área de la física en donde se estudian sistemas en la escala mesoscópica. Muchos sistemas se encuentran en esta área como son los coloides y los cristales líquidos, los cuales son de importancia tanto para la ciencia como para la tecnología. En esta materia se proporcionarán al estudiante los métodos básicos de simulación molecular para materia blanda.

Índice temático:

1. Introducción. Modelado vs Simulación. Teoría vs Experimento. Modelos para simulación molecular. Estocástico vs Determinista.
2. Fundamentos. Trayectorias en el espacio fase. Clasificación de sistemas dinámicos. Como las colisiones afectan la estabilidad de las trayectorias. Cálculo de propiedades termodinámicas. Funciones de distribución. Condiciones de frontera periódicas. Condiciones de mínima imagen.
3. Método de Monte Carlo. Ensamble canónico.
4. Dinámica Molecular.

5. Dinámica Browniana.
6. Propiedades Estáticas. Propiedades termodinámicas simples. Funciones de respuesta Termodinámica. Propiedades entropicas. Estructura estática.
7. Propiedades dinámicas. Función de correlación dependiente del tiempo. Coeficientes de transporte. Estructura dinámica.

#### Bibliografía

- Jean Pierre Hansen and Ian R. McDonald, "Theory of simple liquids, Academic Press, 1990.
- M. P. Allen and D. J. Tildesley, Computer simulation of liquids. Clarendon Press, Oxford, 1987.
- D. Frenkel "Understanding molecular simulation" , Academic Press. 2001.
- J. M. Haile, "Molecular dynamics simulation", John Wiley & sons, inc. 1992.