



ÁTOMOS Y MOLÉCULAS

MATERIA: INTRODUCCIÓN A LAS SIMULACIONES COMPUTACIONALES MOLECULARES

DATOS GENERALES:

Descripción:	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”.
Seriación y Correlación:	Subsecuentes: Métodos Numéricos, Métodos Matemáticos I y II, Física Estadística
	Consecuentes:
Objetivo:	
Objetivos específicos:	
Horas totales del curso:	$(72 + 24) = 96$ horas presenciales + (48) horas de autoestudio = 144 hrs.
Créditos:	8 Créditos

REVISIONES Y ACTUALIZACIONES:

Líneas de investigación:	
--------------------------	--



SOMOS
ARTE, CIENCIA Y
DESARROLLO
CULTURAL



Autores o Revisores:	
Fecha de actualización por academia:	
Sinopsis de la revisión y/o actualización:	

PERFIL DESEABLE DEL DOCENTE:

Disciplina profesional:	Doctorado en Ciencias
Experiencia docente:	Experiencia profesional docente mínima de dos años

ÍNDICE TEMÁTICO:

TEMA:	
Elementos matemáticos básicos	Entropía y Temperatura. Mecánica Clásica Estadística.
Simulaciones de Método Montecarlo	El Método Montecarlo. Un Algoritmo Básico de Monte Carlo. Movimientos Prueba.
Simulaciones de mecánica molecular	La Idea de la Técnica. Un Programa. Ecuación de Movimiento. Experimentos Computacionales. Aplicaciones.
Dinamica molecular en varios ensambles	Dinámica Molecular a Temperatura Constante. Dinámica Molecular a Presión Constante.

BIBLIOGRAFIA

Principal:	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.
Enlaces digitales:	
Complementaria:	



SOMOS
ARTE, CIENCIA Y
DESARROLLO
CULTURAL



PLANEACIÓN EDUCACIONAL:

Competencias generales:	<ol style="list-style-type: none"> 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
Competencias específicas:	<ol style="list-style-type: none"> 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.

CONTRIBUCIÓN AL PERFIL DE EGRESO:

CONOCIMIENTO:	HABILIDADES:	VALORES:
<p>Tener una comprensión profunda de los conceptos, métodos y principios fundamentales de las ondas electromagnéticas y su interacción con la materia</p> <p>Conocer y saber aplicar las técnicas espectroscópicas.</p> <p>Las metodologías básicas para la indagación y el descubrimiento en procesos de investigación.</p>	<p>Construir modelos simplificados que describan una situación compleja, identificando sus elementos esenciales y efectuando las aproximaciones necesarias.</p> <p>Operar e interpretar espectros vibracionales.</p> <p>Adquirir habilidades sobre los procesos de aprendizaje y autorregularlos para desarrollar la capacidad de aprender por sí mismo.</p>	<p>Tener hábitos de trabajo necesarios para el desarrollo de la profesión tales como el rigor científico, el autoaprendizaje y la persistencia.</p> <p>Actuar con responsabilidad, honradez y ética profesional, manifestando conciencia social de solidaridad y justicia.</p> <p>Mostrar tolerancia en su entorno social, aceptando la diversidad cultural, étnica y humana.</p>



SOMOS
ARTE, CIENCIA Y
DESARROLLO
CULTURAL



		Desarrollar un mayor interés por aquellos problemas cuya solución sea de beneficio social y el medio ambiente
--	--	---

ESTRATEGIAS PEDAGÓGICAS:

Estrategias de enseñanza:	Estrategias de aprendizaje:
<ul style="list-style-type: none"> ● El docente explicará la teoría y presentará ejemplos en las clases presenciales o virtuales. ● El docente presentará los procedimientos y métodos típicos para análisis espectral. ● Motivaré a los estudiantes para trabajar de manera individual y en equipo. ● Sesiones de trabajo experimental individual o grupal ● Discusión de preguntas y problemas en clase. 	<ul style="list-style-type: none"> ● El alumno asistirá al menos a un 80% de las clases principales o virtuales impartidas. ● El alumno asistirá al menos a un 80% de las clases prácticas impartidas. ● El estudiante trabajará en forma individual o por equipo en la comprensión de conceptos y la resolución de problemas. ● El estudiante desarrollará mapas conceptuales y mentales de los temas revisados ● El estudiante contestará preguntas o resolverá problemas individualmente para exponer en clase y discutir con sus compañeros. ● Asistirá a asesorías para resolver dudas sobre la teoría o sobre la solución de problemas.

PROPUESTA DE CRITERIOS DE EVALUACIÓN:

Criterio de evaluación:	Porcentaje:
-------------------------	-------------



SOMOS
ARTE, CIENCIA Y
DESARROLLO
CULTURAL



Exámenes parciales	30 %
Tareas	30%
Exposiciones	20%
Participación en clase	10%
Asistencia	10%