



Universidad de Sonora
División de Ciencia Exactas y Naturales
Departamento de Física
Licenciatura en Física

Métodos numéricos y computacionales en materiales suaves

Eje formativo:	Especializante		
Requisitos:	Fisicoquímica		
Carácter:	Optativo		
Horas:	Teoría	Taller	Laboratorio
	3	2	0
Créditos:	08		
Servicio del:	Departamento de		
	Física		

1. Introducción

En esta asignatura se pretende cubrir los elementos básicos que permitan llevar a cabo simulaciones moleculares de sistemas macromoleculares en equilibrio termodinámico, además de implementar las nuevas herramientas (hardware y software) disponibles en el Departamento de Física en la solución de problemas específicos.

2. Objetivo general

En esta asignatura el estudiante conocerá y aplicará los métodos numéricos y computacionales necesarios para resolver problemas en el campo de la Simulación Molecular.

3. Objetivos específicos

Al término del curso el estudiante debe ser capaz de:

- ✓ Aplicar los conocimientos adquiridos sobre los métodos y algoritmos computacionales que le permiten simular el comportamiento de diversos sistemas macromoleculares.
- ✓ Implementar los algoritmos de dinámica Browniana, Monte Carlo y dinámica molecular para diversos sistemas físicos.
- ✓ Calcular propiedades estructurales y termodinámicas a partir de los resultados de simulaciones moleculares.

4. Temario

- 1) Introducción
- 2) Descripción básica de los diferentes métodos de simulación Molecular.
- 3) Elementos básicos de métodos numéricos y programación fortran
- 4) Simulación de Monte Carlo
- 5) Dinámica Molecular.
- 6) Dinámica Browniana.
- 7) Aplicaciones en suspensiones coloidales simples.
- 8) Aplicación en Líquidos simples
- 9) Aplicación en soluciones poliméricas.

5. Estrategias didácticas

Se recomienda que el profesor exponga los aspectos relevantes para el entendimiento de los principios que sustentan la simulación molecular y el Alumno por su parte, mediante trabajo individual o de grupo implemente los algoritmos básicos que permiten resolver problemas de aplicación relacionados con los temas cubiertos y lleva a cabo la exposición frente a grupo de problemas específicos o tópico de interés.

6. Estrategias para la evaluación

Se sugiere que el profesor realice 2 evaluaciones parciales (40%) y una evaluación de trabajo computacional práctico (60%).

7. Bibliografía

- 1) Computer Simulation of Liquids. M.P. Allen y D.J. Tildesley, Clarendon Press 1986.

- 2) Understanding Molecular Simulation (From algorithms to applications), D. Frenkel y B. Smith, Academic Press 1996
- 3) Theory of Simple Liquids, J.P. Hansen y I.R McDonald, Academic Press 1976

8. Perfil docente

El profesor de este curso deberá poseer una sólida formación en física y amplia experiencia en la enseñanza en la Licenciatura en Física y conocimiento de programación y análisis numérico. Es importante que el profesor tenga conocimiento claro de la importancia de la asignatura en el plan de estudios y su relación con el resto del programa.