

UNIVERSIDAD DE GUANAJUATO									
Nombre de la Unidad Académica:		División de Ciencias e Ingenierías							
Nombre del Programa Educativo:		Maestría en Ciencias Aplicadas							
Nombre de la Unidad de Aprendizaje:		Simulación Molecular II (Dinámica Molecular)				Clave:		SM-II	
Fecha de Elaboración:		09-Febrero-2012				Horas/Semana/Semestre			
Prerrequisitos					Teoría Presenciales		4		
Cursada y Aprobada:					Trabajo individual		7		
Cursada:					Créditos:		8		
Caracterización de la Unidad de Aprendizaje									
Por el tipo de conocimiento:		Disciplinaria	Formativa	Metodológica	X				
Por la dimensión del Conocimiento:		Básica	General	Profesional	X				
Por la Modalidad de Abordar el Conocimiento:		Curso	X	Taller	X	Laboratorio	Seminario		
Por el Carácter de la Unidad de Aprendizaje:		Obligatoria	Recursable	Optativa	X	Selectiva	Acreditable		
Es Parte de un Tronco Común?		Sí	No	X					
Objetivos de la Unidad de Aprendizaje									
Aprender el uso de la Simulación Molecular, en particular, de la Dinámica Molecular, como una poderosa herramienta para contrastar soluciones analíticas (teoría), resolver problemas que no tienen solución analítica y substituir datos experimentales cuando no se tienen ó son difíciles de adquirir. Explicar y predecir fenómenos fisicoquímicos con los conocimientos adquiridos. Este curso es continuación del curso de Simulación Molecular I, en donde se adquieren las bases necesarias para cursar éste.									
Contribución de la Unidad de Aprendizaje al Logro del Perfil de Egreso									
Tener un manejo amplio de la Simulación Molecular como una herramienta para el cálculo de propiedades en diferentes tipos de sistemas.									
Nombre del Programa		Maestría en Ciencias Aplicadas	Nombre de la Unidad de Aprendizaje			Simulación Molecular II (Dinámica Molecular)		Clave:	SM-II
Tiempo Estimado Para el Logro de los Objetivos: 64 horas de clase					Criterios de Evaluación para Acreditar el Curso: Participación en clase, laboratorio, tareas y exámenes.				
Unidades y Objetos de Estudio		Objetivos Terminales	Productos de Aprendizaje	Actividades de Aprendizaje	Insumos Informativos	Actividad Evaluativa			
1. INTRODUCCION Y CONCEPTOS BASICOS EN DINAMICA MOLECULAR		Que el estudiante se familiarice con las bases que sustentan la dinámica molecular	Conocimientos sobre los conceptos básicos de la dinámica molecular y su diferencia con respecto al Monte Carlo	Asistencia a clases Participación en clases	Bibliografía	Tareas y exámenes Exposiciones en clase Desarrollo de proyectos Participación en clase Participación en discusiones grupales Autoevaluación y coevaluación Portafolio de evidencias En caso de laboratorio:			

					reportes de prácticas y bitácora
<p>2. IMPLEMENTACION DE TU PRIMER CODIGO DE SIMULACION DM</p> <p>2.1. Inicialización</p> <p>2.2. El cálculo de las fuerzas</p> <p>2.3. Integrando las ecuaciones de movimiento</p> <p>2.4. Ecuaciones de movimiento</p> <p>2.4.1 Otros algoritmos</p> <p>2.4.2 Esquemas a mayores órdenes</p> <p>2.4.3 Formulación de Liouville de los algoritmos de tiempo reversible</p> <p>2.4.4 Inestabilidad de Lyapunov</p> <p>2.4.5 Algoritmo de Verlet</p> <p>2.5. Experimentos computacionales</p> <p>2.5.1 Difusión</p> <p>2.5.2 Midiendo correlaciones</p> <p>2.6. Algunas aplicaciones</p>	<p>Que el estudiante aprenda a programar e implementar su propio código de dinámica molecular NVT para un potencial intermolecular de su elección</p>	<p>Código de simulación DM-NVT para un cierto potencial</p>	<p>Asistencia a clases</p> <p>Participación en clases</p> <p>Programación e implementación de códigos</p>	<p>Bibliografía</p>	<p>Tareas y exámenes</p> <p>Exposiciones en clase</p> <p>Desarrollo de proyectos</p> <p>Participación en clase</p> <p>Participación en discusiones grupales</p> <p>Autoevaluación y coevaluación</p> <p>Portafolio de evidencias</p> <p>En caso de laboratorio: reportes de prácticas y bitácora</p>
<p>3. DIFERENTES COLECTIVOS</p> <p>3.1. DM a temperatura constante</p> <p>3.1.1 El termostato de Andersen</p> <p>3.1.2 El termostato de Nosé-Hoover</p> <p>3.1.3 Cadenas de Nosé-Hoover</p> <p>3.2. Dinámica molecular a presión constante</p>	<p>Que el estudiante sea capaz de modificar su código de dinámica molecular NVT para calcular propiedades en el colectivo NPT</p>	<p>Código de simulación DM-NPT para un cierto potencial</p>	<p>Asistencia a clases</p> <p>Participación en clases</p> <p>Programación e implementación de códigos</p>	<p>Bibliografía</p>	<p>Tareas y exámenes</p> <p>Exposiciones en clase</p> <p>Desarrollo de proyectos</p> <p>Participación en clase</p> <p>Participación en discusiones grupales</p> <p>Autoevaluación y coevaluación</p> <p>Portafolio de evidencias</p> <p>En caso de laboratorio: reportes de prácticas y bitácora</p>
<p>4. SIMULACIONES ATOMISTICAS UTILIZANDO UN PAQUETE DE SIMULACION MOLECULAR</p> <p>4.1. Grados de libertad</p>	<p>Que el estudiante se familiarice con el paquete de simulación GROMACS y que</p>	<p>Una simulación de un sistema sencillo, pero atómico, usando GROMACS</p>	<p>Asistencia a clases</p> <p>Participación en clases</p>	<p>Bibliografía</p>	<p>Tareas y exámenes</p> <p>Exposiciones en clase</p> <p>Desarrollo de proyectos</p> <p>Participación en clase</p> <p>Participación en</p>

internos	aprenda a		Programación e		discusiones grupales
4.2. Como modelar las interacciones intramoleculares	implementar una simulación en dicho software		implementación de códigos		Autoevaluación y coevaluación
4.3. Uso de GROMACS					Portafolio de evidencias
4.4. Aplicación a polímeros (o alguna otra, dependiendo del profesor y de los intereses de los estudiantes)					En caso de laboratorio: reportes de prácticas y bitácora
Fuentes de Información					
Bibliografía Básica:			Bibliografía Complementaria:		
<ol style="list-style-type: none"> 1. Frenkel, D.; Smit, B. Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications, 2nd ed.; Academic Press: U. S. A., 2002. 2. Allen, M. P.; Tildesley, D. J. Computer Simulation of Liquids; Clarendon Press: Oxford, 1987. 3. McQuarrie, D. A. Statistical Mechanics, University Science Books: USA, 2000. 			Otras Fuentes de Información: <ol style="list-style-type: none"> 4. http://www.ccp5.ac.uk/ 1. http://www.princeton.edu/che/people/faculty/panagiotopoulos/group/ 2. 3. http://webbook.nist.gov/chemistry/ 5. http://www.gromacs.org/ 		
Artículos de investigación se irán dando sobre la marcha.					