

**FICHA IDENTIFICATIVA****Datos de la Asignatura**

Código	43989
Nombre	Mecánica estadística y aplicaciones en simulación
Ciclo	Máster
Créditos ECTS	5.0
Curso académico	2022 - 2023

Titulación(es)

Titulación	Centro	Curso	Periodo
2184 - M.U. en Química Teórica y Modelización Computacional 13-V.1	Facultad de Química	1	Anual

Materias

Titulación	Materia	Caracter
2184 - M.U. en Química Teórica y Modelización Computacional 13-V.1	1 - Fundamentos	Obligatoria

Coordinación

Nombre	Departamento
SANCHEZ MARIN, JOSE	315 - Química Física
TUÑÓN GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO	315 - Química Física

RESUMEN**CONOCIMIENTOS PREVIOS****Relación con otras asignaturas de la misma titulación**

No se han especificado restricciones de matrícula con otras asignaturas del plan de estudios.

Otros tipos de requisitos

No hay requisitos previos.



COMPETENCIAS

2184 - M.U. en Química Teórica y Modelización Computacional 13-V.1

- Que los/las estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.
- Que los/las estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios.
- Que los/las estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.
- Que los/las estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo
- Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.
- Los estudiantes deben ser capaces de fomentar, en contextos académicos y profesionales, el avance tecnológico y científico dentro de una sociedad basada en el conocimiento y en el respeto a: a) los derechos fundamentales y de igualdad de oportunidades entre hombres y mujeres, b) los principios de igualdad de oportunidades y accesibilidad universal de las personas con discapacidad y c) los valores propios de una cultura de paz y de valores democráticos.
- El estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales.
- Comprender los fundamentos teóricos y prácticos de técnicas con las que puede analizar la estructura electrónica, morfológica y estructural de un compuesto.
- El estudiante comprende la base de la Mecánica Estadística formulada a partir de las colectividades.
- El estudiante debe saber calcular funciones de partición y aplicar las estadísticas cuánticas y la clásica a los sistemas ideales de interés en Química.
- El estudiante comprende y maneja las herramientas matemáticas requeridas para el desarrollo de la Química Teórica en sus aspectos fundamentales y sus aplicaciones.

RESULTADOS DE APRENDIZAJE

El curso está organizado en dos partes bien diferenciadas. La primera parte se dedica al estudio de los fundamentos de la Mecánica Estadística y la segunda parte se centra en las aplicaciones en simulación.

En la parte correspondiente a la Mecánica Estadística se busca que los alumnos comprendan la base de la Mecánica Estadística formulada a partir de las colectividades. El alumno debe entender las características de los colectivos más importantes (microcanónico, canónico y grancanónico), y saber elegir el más conveniente según sea el sistema químico que se desee estudiar. También debe entender las diferencias entre las estadísticas cuánticas de Fermi-Dirac y de Bose-Einstein, así como las situaciones en las que



estas conducen al límite clásico. El alumno debe saber calcular funciones de partición y aplicar las estadísticas cuánticas y la clásica a los sistemas ideales de interés en Química. Tendrán que comprender las diferencias entre sistemas reales e ideales, analizando las características de gases reales y fases condensadas. Además se abordará el estudio mecano estadístico de sistemas de no equilibrio. Por último y dada la dificultad de encontrar resultados analíticos para muchos problemas, se analizarán los métodos de simulación con especial atención al método de MonteCarlo que permite obtener soluciones numéricas en sistemas y situaciones complejas.

Como aplicaciones los alumnos calcularán, haciendo uso de la información obtenida desde primeros principios mediante programas de cálculo de Química Cuántica (p.ej., GAMESS, GAUSSIAN,..), las funciones de partición y las correcciones entálpicas y entrópicas a diferencias de energías libres en distintas situaciones de interés químico (p.ej., constantes de equilibrio termodinámico de una reacción en fase gas). Además, en otras aplicaciones se determinarán diferentes propiedades macroscópicas usando simulaciones mediante Dinámica Molecular o métodos Monte Carlo, empleando los campos de fuerza apropiados para describir las interacciones moleculares (p.ej. TraPPE, GROMOS,..). Ejemplos de algunas de las aplicaciones a realizar: 1) cálculo de una tensión superficial líquido-vapor (p.ej., etanol), 2) cálculo de una tensión interfacial líquido-líquido (p.ej., dodedano/agua), 3) cálculo de un coeficiente de difusión en una mezcla de gases (p.ej., N_2 y O_2 en el aire), 4) cálculo de una isoterma de adsorción gas/sólido absorbente (p.ej., CO_2 sobre una zeolita).

DESCRIPCIÓN DE CONTENIDOS

1. 1- Mecánica Estadística

- Colectivos y postulados de la mecánica estadística.
- Colectivos microcanónico, canónico y gran-canónico.
- Estadísticas de Fermi-Dirac, Bose-Einstein y Boltzmann.
- Mecánica estadística clásica.
- Aplicaciones a sistemas ideales: gases ideales, gas ideal de fotones, fonones, electrones en metales.
- Sistemas de partículas que interactúan: gases reales diluidos, segundo coeficiente del virial, ecuación de van der Waals.
- Mecánica estadística en sistemas de no equilibrio.
- Simulaciones de MonteCarlo.

2. 2- Aplicaciones

- Cálculo de funciones de partición moleculares y propiedades macroscópicas para una reacción en fase gas (U , S , G , K ,...) a varias temperaturas.
- Cálculo de una tensión superficial líquido-vapor.
- Cálculo de una tensión interfacial líquido-líquido.
- Cálculo de una isoterma de adsorción tipo gas/sólido absorbente.

**VOLUMEN DE TRABAJO**

ACTIVIDAD	Horas	% Presencial
Clases de teoría	25,00	100
Seminarios	10,00	100
Elaboración de trabajos individuales	30,00	0
Estudio y trabajo autónomo	40,00	0
Preparación de clases prácticas y de problemas	20,00	0
TOTAL	125,00	

METODOLOGÍA DOCENTE

Lección Magistral: El profesor expondrá los contenidos del curso en sesiones presenciales de dos horas basándose en los materiales docentes publicados en la plataforma Moodle.

Docencia en red. Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma moodle (<http://www.uam.es/moodle>). Publicación de contenidos de la asignatura, herramientas de trabajo en grupo: foros de discusión y wiki, correo electrónico

Seminarios online. Con posterioridad a las clases expositivas, se realizarán seminarios online para discutir los resultados obtenidos en los trabajos propuestos, las dudas sobre las metodologías empleadas, y supervisar la preparación de los informes elaborados por los estudiantes.

Tutorías. El profesor realizará tutorías individuales o con grupos reducidos sobre cuestiones puntuales que los estudiantes puedan plantear.

Laboratorio computacional. En varias sesiones prácticas los alumnos harán cálculos sobre diferentes propiedades macroscópicas de interés químico, aplicando los conocimientos teóricos de Mecánica Estadística previamente explicados.

EVALUACIÓN**Convocatoria ordinaria**

Los conocimientos adquiridos por el estudiante serán evaluados a lo largo de todo el curso, intentando que el estudiante avance de forma regular y constante en la asimilación de los contenidos de la asignatura.

La nota final de la asignatura se basará en los ejercicios, trabajos y discusión de los mismos que se irá realizando durante el curso. Dichos trabajos se puntuarán en base a los siguientes porcentajes:

- 60 % Realización de ejercicios relacionados con la asignatura,



- 40 % Finalización de una de las prácticas realizadas en clase y entrega de un informe crítico sobre la misma.

Convocatoria extraordinaria

Se realizará un examen final único que será de carácter teórico y práctico, y que abarcará los contenidos de toda la asignatura. La parte práctica constará de un trabajo individual que tiene que realizar el estudiante con los programas utilizados a lo largo del curso. La puntuación en la convocatoria extraordinaria se realizará en base a los siguientes porcentajes:

- 70% el examen final,
- 30 % Realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.

REFERENCIAS

Básicas

- Theoretical and Computational Chemistry: Foundations, Methods and Techniques. J. Andrés y J. Bertrán. Eds. Publ. Univ. Jaime I (Castellón) 2007
- Chandler, D., "Introduction to Modern Statistical Mechanics", (Oxford University Press, London, 1986)
- Hill, T. L., An Introduction to Statistical Thermodynamics (Dover, New York) 1986
- McQuarrie, D. A., Statistical Mechanics, (Harper and Row, New York) 1976
- Toda, M., Kubo, R., Saito, N., "Statistical Physics I, (Springer-Verlag, Heidelberg) 1992
- Frenkel, D, Smit, B., Understanding Molecular Simulation (Academic Press, San Diego) , 2002