



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO  
PROGRAMA DE  
MAESTRIA Y DOCTORADO EN CIENCIAS QUIMICAS



Programa de actividad académica

Nombre de la asignatura: <b>Dinámica molecular</b>			
Clave:	Semestre:	Campo de conocimiento: Química	No. Créditos: 6
Carácter: Optativa de elección	Horas por semana	Total horas/ semana	Total horas/ semestre
Tipo: Curso	Teoría:	Práctica:	
	4		
Modalidad: Presencial	Duración del programa: 16 semanas		

Actividad académica con seriación antecedente: Se asume que el alumno posee conocimientos básicos sobre mecánica clásica, cuántica, mecánica estadística y termodinámica. Es deseable estar familiarizado con los comandos básicos del sistema operativo Linux y tener laptop para tareas en casa.

Objetivo general: Se tiene como propósito dar una visión amplia sobre las teorías, métodos y técnicas contemporáneas de simulación molecular por computadora y que actualmente se usan para la caracterización de sistemas moleculares dinámicos. Al final del curso los alumnos estarán familiarizados con:

1. Las teorías para el cálculo de estructura electrónica
2. Las metodologías y estrategias para la realización de simulaciones de dinámica molecular
3. El cálculo de propiedades microscópicas y su relación con las observables macroscópicas y termodinámicas.

Objetivos específicos:

Se instruirá a los estudiantes en el uso de programas como NWChem, Gaussian, DeMon2K, TeraChem, Gromacs, etc. Las simulaciones moleculares se harán en computadoras personales de los estudiantes y, dependiendo de permisos, haciendo uso de los CPUs y GPUs de la UNAM.

Índice temático			
Unidad	Tema	Horas	
		Teóricas	Prácticas
1	<b>Introducción</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Revisión de la teoría clásica de partículas (leyes de conservación, teorías de Newton, Lagrange, Hamilton, Hamilton-Jacobi, Parentesis de Poisson, etc.), las ecuaciones de movimiento y los integradores para su solución.</li> <li>• Revisión de la teoría cuántica de partículas (postulados y principios de la mecánica cuántica, dualidad onda-partícula, etc.)</li> </ul>		
2	<b>Ecuaciones fundamentales y dinámica molecular</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Ecuación de Schroedinger dependiente del tiempo</li> <li>• Desacoplando la ecuación de Schroedinger dependiente del tiempo para electrones y núcleos</li> <li>• Ecuación de Schroedinger independiente del tiempo</li> <li>• Desacoplando la ecuación de Schroedinger independiente del tiempo para electrones y núcleos (Teoría perturbativa y adiabática Born-Oppenheimer)</li> <li>• El caso particular de moléculas diatómicas (Hamiltoniano, eigenfunciones, eigenvalores, vibraciones, rotaciones, reglas de selección, espectro IR-Raman, etc.)</li> </ul>		

	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Aproximación de partícula clásica para núcleos (integradores en el tiempo, etc.)</li> </ul>		
3	<b>Estructura electrónica</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Aproximación de partícula independiente (esquema Hartree)</li> <li>• Elementos de matriz de funciones de onda tipo determinante</li> <li>• Teorías de campo promedio-autoconsistente</li> <li>• Teoría Hartree-Fock</li> <li>• Aproximación de funciones de onda tipo multideterminante</li> <li>• Formulación en términos de la matrix densidad</li> <li>• Primeras aproximaciones (infancia) de la teoría de funcionales de la densidad</li> <li>• Fundamentos de la teoría de funcionales de la densidad (teoremas Hohenberg-Kohn)</li> <li>• Implementación de la teoría de funcionales de la densidad (ecuaciones Kohn-Sham, etc.)</li> <li>• Aproximación Carr-Parrinello</li> <li>• Teoría perturbativa dependiente and independiente del tiempo</li> </ul>		
4	<b>Simplificación de ecuaciones</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Métodos semi-empíricos</li> <li>• Potenciales efectivos de coraza (para metales), potenciales modelo (para sistemas de muchas partículas) y campos de fuerza (para sistemas biológicos)</li> <li>• Métodos híbridos (QM/MM, etc.)</li> <li>• Simetría</li> </ul>		
5	<b>Atajos computacionales</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Escalamiento lineal</li> <li>• Métodos de fragmentación (dividir-y-conquistar, VEDA, etc.)</li> <li>• Paralelización (MPI, PVM, etc.)</li> <li>• Últimas tecnologías computacionales (supercómputo en clusters de PCs, GPUs, etc.)</li> </ul>		
6	<b>Contacto con mecánica-estadística y termodinámica</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Estadística de partículas clásicas y cuánticas, región clásica y cuántica por temperatura, variables termodinámicas PVT</li> <li>• Teoría de Lagrangianos extendidos</li> <li>• Indicadores de transición de fase, marcadores termodinámicos, etc.</li> <li>• Modelos más recientes de confinamiento y bajo efectos de temperatura.</li> </ul>		
<b>Total de horas teóricas:</b>			
<b>Total de horas prácticas:</b>			
<b>Suma total de horas:</b>			

**Bibliografía básica actualizada:**

- **Fundamentals of Molecular Dynamics**, Rubén Santamaría, en preparación, 2016.
- **Quantum Chemistry**, Ira N. Levine, Prentice Hall, New Jersey, 1991.
- **Elementary Quantum Chemistry**, Frank L. Pilar, McGraw-Hill, London, 1968.
- **Introduction to Quantum Mechanics: with applications to Chemistry**, Linus Pauling and Edgar Bright Wilson Jr., Dover, New York, 1985.

- **Moder Quantum Chemistry, Attila Szabo and Neil S. Ostlund, Dover Publications, 1989.**
- **Density Functional Theory, Robert G. Parr and Weitao Yang, Oxford University Press, Oxford, 1989.**
- **Ab-initio Molecular Orbital Calculations for Chemists, W.G. Richards and D.L. Cooper, Clarendon Press, Oxford, 1985.**
- **Electron Correlation, Peter Fulde, Springer-Verlag, New York, 1993.**
- **Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods, James B. Foresman and AEleen Frisch, Gaussian Inc., Pittsburgh, 1996.**
- **Thermodynamics, Kinetic Theory and Statistical Thermodynamics, Francis W. Sears and Gerhard L. Salinger, Addison-Wesley, Menlo Park, California, 2nd ed. 1978.**
- **Statistical Mechanics, R. K. Pathria, Butterworth-Heinemann, Oxford, 2nd ed. 2001.**
- **Statistical Mechanics, Ryogo Kubo, Hiroshi Ichimura, Tsunemaru Usui, Natsuki Hashitsume, North-Holland, Amsterdam, 6th ed. 1981.**

**Bibliografía complementaria:**

<b>Sugerencias didácticas:</b>		<b>Mecanismos de evaluación del aprendizaje de los alumnos:</b>	
Exposición oral	( )	Exámenes parciales	( )
Exposición audiovisual	( )	Examen final escrito	( )
Ejercicios dentro de clase	( )	Trabajos y tareas fuera del aula	(X)
Ejercicios fuera del aula	( )	Exposición de seminarios por los alumnos	(X)
Seminarios	( )	Participación en clase	( )
Lecturas obligatorias	( )	Asistencia	(X)
Trabajo de investigación	(X)	Seminario	( )
Prácticas de taller o laboratorio	( )	Otras:	( )
Prácticas de campo	( )		
Otras: _____	( )		