



Universidad Autónoma del Estado de México

Licenciatura en Física 2003

Programa de Estudios:

Simulación de Sistemas en Equilibrio



I. Datos de identificación

Licenciatura **Física 2003**

Unidad de aprendizaje **Simulación De Sistemas En Equilibrio** Clave

Carga académica
Horas teóricas Horas prácticas Total de horas Créditos

Período escolar en que se ubica

Seriación
UA Antecedente UA Consecuente

Tipo de Unidad de Aprendizaje

Curso Curso taller
Seminario Taller
Laboratorio Práctica profesional
Otro tipo (especificar)

Modalidad educativa

Escolarizada. Sistema rígido No escolarizada. Sistema virtual
Escolarizada. Sistema flexible No escolarizada. Sistema a distancia
No escolarizada. Sistema abierto Mixta (especificar)

Formación común

Biología 2003 Biotecnología 2010
Matemáticas 2003

Formación equivalente

Unidad de Aprendizaje

Biología 2003
Biotecnología 2010
Matemáticas 2003



II. Presentación

La experimentación en la ciencia, particularmente en la física, no se desarrollan solo en los laboratorios convencionales sino ahora también en los laboratorios de computo. El avance tecnológico que se ha observado en la última década nos permite contar con sistemas de cómputo complejos y a su vez poderosos. Esto nos brinda la oportunidad de realizar simulaciones de sistemas físicos donde se involucra cada vez mas un mayor numero de partículas, para con ello, obtener mejores resultados numéricos. Enfocando a los métodos de simulación como una herramienta complementaria para abordar un problema real de interés, vemos que estos métodos, son importantes e indispensables. Por lo anterior, resulta ser importante el brindar a los discentes una formación profesional completa, ofreciéndoles la oportunidad de aprender y aplicar los métodos de simulación y su aplicación a sistemas en equilibrio, cualquiera que se a su formación profesional, Física, Química, Filología, o carreras afines.

III. Ubicación de la unidad de aprendizaje en el mapa curricular

Núcleo de formación: Integral

Área Curricular: Física computacional

Carácter de la UA: Optativa

IV. Objetivos de la formación profesional.

Objetivos del programa educativo:

Formar especialistas con conocimientos de la Física teórica, experimental y computacional que les permitan participar en la generación, aplicación y difusión de los mismos, colaborando en la solución de problemas de índole social y natural que requieran del conocimiento científico.

Objetivos del núcleo de formación:

Proporcionar una visión integradora de carácter interdisciplinario, multidisciplinario y transdisciplinario para adquirir conocimientos específicos de su interés en los diversos escenarios donde tiene lugar la profesión del Físico.



Objetivos del área curricular o disciplinaria:

Proporcionar las herramientas necesarias para el planteamiento y solución numérica de problemas de la Física auxiliándose de sistemas de cómputo.

V. Objetivos de la unidad de aprendizaje.

Adquirir los elementos básicos para realizar simulaciones utilizando el método de Monte Carlo, para estudiar procesos que no dependen del tiempo. Aplicar ecuaciones de movimiento para estudiar los procesos dependientes del tiempo de sistemas en equilibrio.

VI. Contenidos de la unidad de aprendizaje y su organización

Unidad 1. Introducción

Objetivo: Se plantea dar una breve descripción del contenido de la unidad de aprendizaje a los discentes, dándoles la información concerniente de los alcances y limitaciones de los métodos de simulación por computadora.

Unidad 2. Métodos de simulación: ensambles y algoritmos

Objetivo: Se revisa el material concerniente a los diferentes métodos para realizar una simulación por computadora. Se incluye un breve repaso del concepto de ensamble y de los diferentes tipos de algoritmos que se pueden usar en una simulación. Modelo de Ising, Algoritmos de Metrópolis, Glauber y Kawasaki, Métodos de clusters y Métodos multicanónicos.

Unidad 3. Fluidos simples y sus mezclas

Objetivo: Para comprender los alcances de los métodos de simulación molecular, se calculan propiedades estáticas y dinámicas en una fase de fluidos simples y sus mezclas, también, se estiman propiedades termodinámicas en la interfase líquido-vapor de fluidos simples y sus mezclas (sistemas modelo, coloides, etc.).

Unidad 4. Fluidos moleculares y sus mezclas

Objetivo: Se modelan fluidos moleculares. Se estiman propiedades estáticas y dinámicas en una fase de fluidos moleculares y sus mezclas, también, se estiman propiedades termodinámicas en la interfase líquido-vapor de fluidos simples y sus mezclas (sistemas modelo, coloides, oligómeros, polímeros, miscelas, etc.).



Unidad 5. Fluidos confinados

Objetivo: Se muestra a los discentes como modelar contenedores (paredes) que confinan fluidos simples y/o moleculares.

Unidad 6. Solidos

Objetivo: Se modelan sistemas en fase sólida así como el equilibrio de fases líquido-sólido.

VII. Sistema de Evaluación

Resolver ejercicios	65%
Tareas y exposición de temas de investigación	25%
Participación en clase	10%

VIII. Acervo Bibliográfico

J.P. Hansen and I.R. McDonald, Theory of simple liquids (Academic Press., 1990).

D.A. McQuarrie, Statistical mechanics (University Science Books, 2000)

G.A. Martynov, Fundamental theory of liquids: Method of distribution functions (IOP Institute of Physics, 1992).

M.P. Allen and D.J. Tildesley, Computer simulation of liquids (Oxford: Clarendon Press., 1987)

D. Frenkel and B. Smit, Understanding molecular simulation (Academic, New York, 1996).

K. Binder and D. W. Heermann, Monte Carlo Simulation in Statistical Physics. An introduction. Springer- Verlag, Berlin (1988).

N.J. Giordano, Computational Physics, (Prentice Hall, 1997)