

# Simulación Molecular – MÓDULO I: FUNDAMENTOS BÁSICOS

Bases físicas y químicas de la Mecánica Estadística

## GUÍA DOCENTE



**INSTRUCCIONES PARA LA ELABORACIÓN Y TRAMITACIÓN DE LAS GUÍAS  
DOCENTES DE LAS ASIGNATURAS**

Tipo de Acción Formativa	Máster Universitario					
Nombre de la Acción Formativa	Simulación Molecular					
Denominación de la asignatura	Bases físicas y químicas de la Mecánica Estadística					
Módulo	MÓDULO I: FUNDAMENTOS BÁSICOS					
Curso académico	2023-2024					
Tipología	Obligatoria					
ECTS	<b>Teoría:</b>	5.00	<b>Práctica:</b>	0.00	<b>Total:</b>	5.00
Periodo de impartición	Del 30 de octubre al 4 de diciembre de 2023					
Modalidad Docente	VIRTUAL					
Web universidad coordinadora	<a href="https://unia.es/estudiantes/actividades-academicas/todos-los-cursos/item/master-universitario-en-simulacion-molecular-3">https://unia.es/estudiantes/actividades-academicas/todos-los-cursos/item/master-universitario-en-simulacion-molecular-3</a>					
Web universidad colaboradora	<a href="http://www.uhu.es/mastersoficiales/estudios/oferta-academica/master-en-simulacion-molecular">http://www.uhu.es/mastersoficiales/estudios/oferta-academica/master-en-simulacion-molecular</a>					
Idioma/s de impartición	Español					

**Responsable/s de la asignatura**

Nombre y apellidos	Email	Universidad	Créditos
--------------------	-------	-------------	----------

**Profesorado**

Nombre y apellidos	Email	Universidad	Créditos
Felipe Jiménez Blas		UNIVERSIDAD DE HUELVA	2.00
José Manuel Romero Enrique		UNIVERSIDAD DE SEVILLA	3.00

**TUTORIAS: Horario y localización**

Aula Virtual de la UNIA: <https://campusvirtual.unia.es/>

**DESCRIPTORES DE CONTENIDOS**

**Descriptores**

Descripción de sistemas físicos utilizando estadística matemática. Relación de la descripción estadística con la Termodinámica clásica. Fuerzas intermoleculares. Descripción de distintos colectivos según las variables termodinámicas de interés. Fluidos clásicos. Sistemas fuera del equilibrio.

**Temario**

Tema 1. Introducción. Límite de validez de la aproximación clásica. Macro y microestados. Método de Gibbs. Densidad de probabilidad en el espacio de fases. Ecuación de Liouville. Postulados básicos. Equilibrio Estadístico.

Tema 2. Fuerzas intermoleculares y modelos de potencial. Introducción a las fuerzas intermoleculares. Interacciones atractivas. Interacciones carga-carga y dipolo-dipolo. Dipolos inducidos. Momentos eléctricos de orden superior. Puentes de hidrógeno. Interacciones repulsivas. Modelos de potencial. Aproximación de interacciones por pares. Modelos sencillos: esfera dura, pozo cuadrado, Lennard-Jones, Mie, Yukawa, etc.

Tema 3. Colectivo microcanónico. Volumen de fases. Sistemas normales. Definición estadística de entropía. Entropía y probabilidad. Gas monoatómico ideal. Paradoja de Gibbs. Definición correcta de entropía.

Tema 4. Colectivo canónico. Densidad de probabilidad. Fluctuaciones de energía. Equivalencia con el colectivo microcanónico. Función de partición. Conexión con la Termodinámica. Teorema de equipartición de la energía.

Tema 5. Colectivo gran canónico. Densidad de probabilidad. Función de partición generalizada. Conexión con la Termodinámica. Fluctuaciones de densidad. Equivalencia con el colectivo canónico.

Tema 6. Fluidos clásicos. Promedios en el espacio de fases. Funciones de distribución. Cálculo e propiedades termodinámicas a partir de  $g(r)$ . Solvatación y equilibrio químico en líquidos. Líquidos moleculares.

Tema 7. Sistemas fuera del equilibrio. Sistemas cerca del equilibrio. Funciones de correlación temporal. Difusión. Propiedades de transporte: viscosidad y conductividad térmica. Conductividad eléctrica. Funciones de respuesta. Teorema de fluctuación-disipación. Movimiento Browniano.

**ACTIVIDADES FORMATIVAS Y METODOLOGÍAS DOCENTES**

Véase la tabla de las actividades formativas.

Actividad formativa	Modalidad de enseñanza	Dedicación (horas de trabajo autónomo del estudiante)	Dedicación (horas de trabajo lectivas del estudiante con apoyo del profesor)
AF1-Actividades dirigidas (clases expositivas, clases de problemas y talleres de programación)	VIRTUAL	35	35
AF2. Actividades supervisadas (tutorías individuales y colectivas y trabajos tutelados)	VIRTUAL	15	15
AF3. Actividades autónomas (realización de problemas,	VIRTUAL	25	0

programas y estudio personal)			
<b>SISTEMA DE EVALUACIÓN</b>			
Véase las estrategias/metodologías de evaluación.			
<b>Estrategias/metodologías de evaluación</b>			<b>Porcentaje de valoración sobre el total</b>
Participación activa en el desarrollo de la materia mediante teledocencia (Adobe Connect) y Campus Virtual (Moodle) (uso del chat, foros, e-mail, etc.)			0-20%%
Realización de problemas y/o programas computacionales, por escrito, sobre los contenidos de la asignatura			20-40%%
Pruebas escritas de evaluación mediante el uso del Campus Virtual (Moodle)			30-50%%
Resolución de cuestionarios y tests de evaluación a través del Campus Virtual (Moodle)			10-30%%
<b>MEDIOS Y RECURSOS DIDÁCTICOS</b>			
<b>BIBLIOGRAFÍA</b>			
<p>D. Chandler, Introduction to Modern Statistical Mechanics, Oxford University Press (New York, 1987).          J. de la Rubia, J. Brey, Mecánica Estadística. Cuadernos UNED (Madrid, 2001).          K. Huang, Introduction to Statistical Physics (Taylor and Francis, New York, 2001).          R. Kubo, Statistical Mechanics. North-Holland (Amsterdam, 1974).          5. L. D. Landau, E. M. Lifshitz, Física Estadística. Vol. Curso de física teórica (Reverté. Barcelona, 1988).          D. A. McQuarrie, Statistical Mechanics (Univ. Sci. Books, 2000).          F. W. Sears, G. L. Salinger, Termodinámica, teoría cinética y Mecánica Estadística (Reverté, Barcelona, 1980).          R. C. Tolman, Principles of Statistical Mechanics (Oxford, 1938).          R. Zwanzig, NonEquilibrium Statistical Mechanics (Oxford, 2001).</p>			
<b>PLAN DE CONTINGENCIA</b>			
No procede, ya que la enseñanza es VIRTUAL.			

Conforme a lo dispuesto en la legislación vigente en materia de protección de datos de carácter personal (Reglamento (UE) 2016/679, de 27 de abril) le informamos que los datos personales que nos ha facilitado pasarán a ser tratados por la UNIVERSIDAD INTERNACIONAL DE ANDALUCÍA como responsable del tratamiento, siendo órgano competente en la materia la Dirección del Área de Gestión Académica (Monasterio Santa María de las Cuevas, C/ Américo Vespucio nº2. Isla de La Cartuja - 41092 - Sevilla) ante quien Ud. puede ejercitar sus derechos de acceso, rectificación, limitación, oposición o portabilidad señalando concretamente la causa de su solicitud y acompañando copia de su documento acreditativo de identidad. La solicitud podrá hacerse mediante escrito en formato papel o por medios electrónicos.

Caso de no obtener contestación o ver desestimada su solicitud puede dirigirse al Delegado de Protección de Datos de la Universidad (rgpd@unia.es Tfno 954 462299) o en reclamación a la Agencia Española de Protección de Datos a través de los formularios que esa entidad tiene habilitados al efecto y que son accesibles desde su página web: <https://sedeagpd.gob.es>

Como responsable, la Universidad le informa que exclusivamente tratará los datos personales que Ud. le facilite para dar cumplimiento a los siguientes fines:

- a) Gestión académica y administrativa de:
  - Participación en procesos de acceso y admisión a las enseñanzas oficiales (Grado, Máster y Doctorado) o de formación Continua de la Universidad Internacional de Andalucía.
  - Inscripción y/o matrícula como alumno en cualquiera de las titulaciones oficiales (Grado, Máster y Doctorado), Formación Continua u otras actividades académicas ofrecidas por la Universidad Internacional de Andalucía.
  - Participación en convocatorias de becas y ayudas al estudio de la Universidad Internacional de Andalucía, la Admón. General del Estado o la de las Comunidades Autónomas y de otras entidades públicas o privadas.
  - Participación en convocatorias de programas de movilidad de carácter nacional o internacional.
  - Obtención y expedición de títulos oficiales, títulos propios y otros títulos académico
- b) Gestión de su participación como estudiante en prácticas y actividades formativas nacionales o internacionales en instituciones, empresas, organismos o en otros centros.
- c) Utilización de servicios universitarios como obtención del carné universitario, bibliotecas, actividades deportivas u otros.

La Universidad se encuentra legitimada para tratar estos datos al ser necesarios para la ejecución de la relación jurídica establecida entre Ud. y la Universidad y para que ésta pueda cumplir con sus obligaciones legales establecidas en la Ley Orgánica 6/2001, de Universidades.

Usted responde de la veracidad de los datos personales que ha proporcionado a la Universidad y de su actualización.

La Universidad comunicará los datos personales que sean indispensables, y nunca en otro caso, a las siguientes categorías de destinatarios:

- A otras Administraciones y organismos públicos para el ejercicio de las competencias que les sean propias y compatibles con las finalidades arriba enunciadas (Así - a modo enunciativo y no limitativo - a Ministerios con competencias en educación y ciencia, a otras administraciones, a otras Universidades o Centros formativos equivalentes para la gestión de traslados, a empresas para la realización de prácticas)
- A entidades bancarias para la gestión de pagos y cobros.
- A organismos públicos o privados en virtud de la celebración de convenios de colaboración o contratos, conforme a lo dispuesto en la legislación vigente en materia de Protección de Datos.
- A los servicios de la propia Universidad que sean adecuados para gestionar la utilización de los servicios universitarios ofertados.

Sus datos de carácter personal se tratarán y conservarán por la Universidad conforme a la legislación vigente en materia de protección de datos, pasando luego a formar parte -previo expurgo - del Archivo Histórico Universitario conforme a lo dispuesto en la legislación sobre Patrimonio Histórico.

La Universidad sólo prevé la transferencia de datos a terceros países en el caso de su participación como alumno en alguno de los programas de formación o becas de carácter internacional. La transferencia se realizará siguiendo las directrices establecidas al respecto por el Reglamento Europeo de Protección de Datos y normativa de desarrollo.

El Servicio de Protección de Datos de la Universidad Internacional de Andalucía cuenta con una página en la que incluye legislación, información y modelos en relación con la Protección de Datos Personales a la que puede acceder desde el siguiente enlace: <https://www.unia.es/protecciondatos>