

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**

| | | | | | | |
|-------------------------------|---|------|------------------|------|---------------|------|
| Curso Académico: | 2022-2023 | | | | | |
| Máster: | Simulación Molecular | | | | | |
| Denominación de la asignatura | Bases físicas y químicas de la Mecánica Estadística | | | | | |
| Módulo | MÓDULO I: FUNDAMENTOS BÁSICOS | | | | | |
| Curso académico | 2022-2023 | | | | | |
| Tipología | Obligatoria | | | | | |
| ECTS | Teoría: | 5.00 | Práctica: | 0.00 | Total: | 5.00 |
| Periodo de impartición | Del 3 de noviembre al 14 de diciembre de 2022 | | | | | |
| Modalidad | VIRTUAL | | | | | |
| Web universidad coordinadora | https://unia.es/estudiantes/actividades-academicas/todos-los-cursos/item/master-universitario-en-simulacion-molecular-3 | | | | | |
| Web universidad colaboradora | http://www.uhu.es/mastersoficiales/estudios/oferta-academica/master-en-simulacion-molecular | | | | | |
| Idiomas de impartición | Español | | | | | |

| 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 (Coordinador/a de asignatura): Horario y localización | | | |
| Aula Virtual de la UNIA https://unia.adobeconnect.com/tutoriasimulacionmolecular | | | |
| COMPETENCIAS | | | |
| Básicas y Generales | CG1: Comprender, analizar, evaluar y seleccionar teorías científicas adecuadas y metodologías precisas para formular juicios a partir de los datos disponibles, bien sean experimentales y/o teóricos, en los ámbitos de la Termodinámica, la Mecánica Estadística y la Simulación Molecular. CG2: Demostrar dominio en la utilización de bibliografía científica | | |

| | |
|----------------------|--|
| | <p>y bases de datos, así como en el análisis de documentos científicotécnicos, en los ámbitos de la Termodinámica, la Mecánica Estadística y la Simulación Molecular.</p> <p>CG3: Comprender y ser capaz de elaborar informes, presentaciones y/o publicaciones científicas en el ámbito de la Simulación Molecular.</p> <p>CG4: Comprender y ser capaz de concebir y planificar un proceso de investigación en el ámbito de la Simulación Molecular.</p> <p>CB6: 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.</p> <p>CB7: Que los 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.</p> <p>CB8: Que los 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.</p> <p>CB9: Que los 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.</p> <p>CB10: Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.</p> |
| <p>Transversales</p> | <p>CT2: Utilizar de manera avanzada las tecnologías de la información y la comunicación.</p> <p>CT3: Gestionar la información y el conocimiento.</p> <p>CT4: Comprometerse con la ética y la responsabilidad social comocidadano y como profesional.</p> <p>CT5: Definir y desarrollar el proyecto académico y profesional.</p> <p>CT6: Sensibilización en temas medioambientales.</p> |
| <p>Específicas</p> | <p>CE6: Comprender las leyes macroscópicas físicas y químicas de</p> |

sistemas en condiciones de equilibrio: propiedades termodinámicas y equilibrio de fases de sustancias puras y mezclas.

CE7: Comprender los principios fundamentales de la Mecánica Estadística de equilibrio y no equilibrio, incluyendo propiedades termodinámicas, estructurales y dinámicas.

CE11: Saber escribir, sintetizar, presentar los resultados científicos en papel, transparencias, posters, así como en trabajos fin de máster, tanto escrito como en presentaciones.

RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Comprender la descripción estadística de un sistema macroscópico a partir de consideraciones de su estructura microscópica constituida por partículas individuales sometidas a las leyes de la Mecánica Clásica. Entender la compatibilidad de esta descripción estadística con la formulación de la Termodinámica. Comprender la diferencia entre los posibles colectivos estadísticos para describir un sistema macroscópico dependiendo de las variables determinadas. Aplicar una descripción estadística formal a la descripción de la estructura y propiedades de un fluido clásico. Conocer la descripción que aplica en el marco de la Mecánica Estadística a un sistema fuera del equilibrio. Derivar de las condiciones de no equilibrio de un fluido la descripción estadística de propiedades de correlación temporal.

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 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, programas y estudio personal) | VIRTUAL | 25 | 0 |

SISTEMA DE EVALUACIÓN

Véase las estrategias/metodologías de evaluación.

OBSERVACIONES

| Estrategias/metodologías de evaluación | Porcentaje de valoración sobre el total |
|---|---|
| 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%% |
| BIBLIOGRAFÍA | |
| <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> | |
| PLAN DE CONTINGENCIA | |
| 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>