



## 32524 - MECÁNICA ESTADÍSTICA Y APLICACIONES EN SIMULACIÓN

### Información de la asignatura

**Código - Nombre:** 32524 - MECÁNICA ESTADÍSTICA Y APLICACIONES EN SIMULACIÓN

**Titulación:** 616 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2013)

651 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional

666 - Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional

748 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional

751 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional Europeo

762 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2021)

**Centro:** 104 - Facultad de Ciencias

**Curso Académico:** 2024/25

### 1. Detalles de la asignatura

#### 1.1. Materia

Mecánica Estadística y Aplicaciones en Simulación.

#### 1.2. Carácter

616 - Obligatoria

762 - Obligatoria

666 - Complementos de Formación

651 - Obligatoria

748 - Obligatoria

751 - Obligatoria

#### 1.3. Nivel

616 - Máster (MECES 3)

666 - Doctorado (MECES 4)

762 - Máster (MECES 3)

651 - Máster (MECES 3)

748 - Máster (MECES 3)

751 - Máster (MECES 3)

#### 1.4. Curso

751 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional Europeo: 1

666 - Programa de Doctorado en Química Teórica y Modelización Computacional: 99

651 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional: 1

748 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional: 1

762 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2021): 1

616 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2013): 1

#### 1.5. Semestre

Anual

#### 1.6. Número de créditos ECTS

5.0

<b>Código Seguro de Verificación:</b>		<b>Fecha:</b>	08/07/2024	1/4
<b>Firmado por:</b>	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
<b>Url de Verificación:</b>		<b>Página:</b>	1/4	

## 1.7. Idioma

English

## 1.8. Requisitos previos

No hay

## 1.9. Recomendaciones

No hay

## 1.10. Requisitos mínimos de asistencia

La asistencia a las clases es obligatoria.

## 1.11. Coordinador/a de la asignatura

Ramón Sayós Ortega - Universidad de Barcelona

<https://autoservicio.uam.es/paginas-blancas/>

## 1.12. Competencias y resultados del aprendizaje

### 1.12.1. Competencias / Resultados del proceso de formación y aprendizaje

#### BÁSICAS Y GENERALES:

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.

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.

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.

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.

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.

CG01 - Los estudiantes son 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.

CG02 - Los estudiantes son capaces de resolver problemas y tomar decisiones de cualquier índole bajo el compromiso con la defensa y práctica de las políticas de igualdad.

#### TRANSVERSALES:

CT01 - El/la estudiante es capaz de adaptarse a diferentes entornos culturales demostrando que responde al cambio con flexibilidad.

#### ESPECÍFICAS:

CE01 - Los estudiantes demuestran su conocimiento y comprensión de los hechos aplicando conceptos, principios y teorías relacionadas con la Química Teórica y Modelización Computacional.

CE04 - Comprende los fundamentos teóricos y prácticos de técnicas computacionales con las que puede analizar la estructura electrónica, morfológica y estructural de un compuesto e interpreta adecuadamente los resultados.

CE09 - El/la estudiante comprende la base de la Mecánica Estadística formulada a partir de las colectividades.

CE10 - Sabe calcular funciones de partición y aplica estadística cuántica y clásica a los sistemas ideales de interés en Química.

### 1.12.2. 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

<b>Código Seguro de Verificación:</b>		<b>Fecha:</b>	08/07/2024	2/4
<b>Firmado por:</b>	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
<b>Url de Verificación:</b>		<b>Página:</b>	2/4	

desea 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., dodecano/agua), 3) cálculo de un coeficiente de difusión en una mezcla de gases (p.ej., N<sub>2</sub> y O<sub>2</sub> en el aire), 4) cálculo de una isoterma de adsorción gas/sólido absorbente (p.ej., CO<sub>2</sub> sobre una zeolita).

### 1.12.3. Objetivos de la asignatura

### 1.13. Contenidos del programa

#### 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- Aplicaciones

- Cálculo de funciones de partición moleculares y propiedades macroscópicas para una reacción en fase gas ( $\Delta U$ ,  $\Delta S$ ,  $\Delta G$ ,  $K$ ,...) 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.

### 1.14. Referencias de consulta

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

## 2. Metodologías docentes y tiempo de trabajo del estudiante

### 2.1. Presencialidad

	#horas
Porcentaje de actividades presenciales (mínimo 33% del total)	35
Porcentaje de actividades no presenciales	90

### 2.2. Relación de actividades formativas

Actividades presenciales	Nº horas
Clases teóricas en aula	25
Seminarios	
Clases prácticas en aula	
Prácticas clínicas	

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	08/07/2024	3/4
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	3/4	

Prácticas con medios informáticos	10
Prácticas de campo	
Prácticas de laboratorio	
Prácticas externas y/o practicum	
Trabajos académicamente dirigidos	
Tutorías	
Actividades de evaluación	
Otras	

**Lección Magistral:** El profesor expondrá los contenidos del curso en sesiones presenciales, o, por video conferencia 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 (<https://posgrado.uam.es>). Publicación de contenidos de la asignatura, herramientas de trabajo en grupo: foros de discusión y wiki, correo electrónico.

**Seminarios.** Con posterioridad a las clases expositivas, se realizarán seminarios para abordar la aplicación de los conceptos teóricos a la resolución de cuestiones y problemas relacionados con la materia así como para discutir 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..

### 3. Sistemas de evaluación y porcentaje en la calificación final

#### 3.1. Convocatoria ordinaria

La nota final vendrá dada por la realización de unos ejercicios, un test y un informe sobre las prácticas. Los porcentajes de este criterio estarán divididos en:

-60% corresponderá a la realización de ejercicios y de un test.

-40% informe que se discutirá en tutorías y/o seminarios sobre las prácticas realizadas en la asignatura.

##### 3.1.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final (máximo 70% de la calificación final o el porcentaje que figure en la memoria)	60
Evaluación continua	40

#### 3.2. 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% Examen final,
- 30 % realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.

##### 3.2.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final (máximo 70% de la calificación final o el porcentaje que figure en la memoria)	70
Evaluación continua	30

### 4. Cronograma orientativo

Por favor, comprobar el horario oficial publicado en la página web del Máster.

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	08/07/2024	4/4
Firmado por:	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
Url de Verificación:		Página:	4/4	