

Simulación Molecular – MÓDULO III: TÉCNICAS DE SIMULACIÓN

Monte Carlo avanzado

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	Monte Carlo avanzado					
Módulo	MÓDULO III: TÉCNICAS DE SIMULACIÓN					
Curso académico	2023-2024					
Tipología	Obligatoria					
ECTS	Teoría:	5.00	Práctica:	0.00	Total:	5.00
Periodo de impartición	Del 13 de marzo al 23 de mayo de 2024					
Modalidad Docente	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					
Idioma/s de impartición	Español					

Responsable/s de la asignatura

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

Profesorado

Nombre y apellidos	Email	Universidad	Créditos
Eva González Noya		Instituto de Química Física Rocasolano (IQFR/CSIC)	2.00
Alessandro Patti		UNIVERSIDAD DE GRANADA	1.50
Guillermo Jorge Zarragoicoechea		UNIVERSIDAD NACIONAL DE LA PLATA	1.50

TUTORIAS: Horario y localización

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

DESCRIPTORES DE CONTENIDOS

Descriptores

Primer Principio de la Termodinámica. Segundo Principio de la Termodinámica. Formulaciones alternativas de la Termodinámica. Regla de las fases de Gibbs. Diagramas de fase. Equilibrio de fase de sistemas puros y mezclas

Temario

Tema 1. Conceptos básicos y definiciones. El sistema y el exterior. Tipos de paredes y ligaduras. Paredes adiabáticas. Sistemas simples y sistemas compuestos. Estado termodinámico. Estados de equilibrio. Procesos termodinámicos. Propiedades derivadas.

Tema 2. Primer principio de la Termodinámica. Trabajo. Calor. Energía interna. Primer principio de la Termodinámica. Aplicaciones del primer principio. Ecuación del gas ideal.

Tema 3. Segundo principio de la Termodinámica. Procesos cuasiestáticos. Procesos reversibles e irreversibles. Máquinas térmicas. El teorema de Clausius. El ciclo de Carnot. Entropía. Ecuación fundamental de la Termodinámica. Ecuación de Euler. Relación de Gibbs-Duhem.

Tema 4. El formalismo termodinámico. Postulados de la Termodinámica. Representación energética. Principio extremal de la energía. Representación entrópica. Principio extremal de la entropía. Propiedades extensivas e intensivas. Transformadas de Legendre. Formulaciones de la Termodinámica alternativas. Relaciones de Maxwell. Método de los jacobianos.

Tema 5. Criterios de estabilidad. Introducción. El criterio de estabilidad. Sustancias puras. Sistemas binarios. Sistemas ternarios. Estados críticos.

Tema 6. Equilibrio de fase y estabilidad. Transiciones de fase de primer orden. Discontinuidad del volumen: regla de la palanca. Discontinuidad de la entropía: calor latente. Estados metaestables. Ecuación de Clausius-Clapeyron. Regla de las fases de Gibbs. Diagramas de fase. Componentes puros. Mezclas binarias.

Tema 7. Aplicaciones a sistemas puros y mezclas. Ecuación de van der Waals. Principio de los estados correspondientes. Ecuaciones de estado PVTN para fluidos. Relaciones PVTN para mezclas. Propiedades de mezcla. Mezclas de gases ideales y disoluciones ideales. Reacciones químicas y equilibrio químico. Grado de reacción. Reacciones simultáneas. Calor de reacción. Estabilidad y principio de Le Châtelier. Regla de las fases de Gibbs para sistemas químicos. Reacciones químicas en gases ideales.

ACTIVIDADES FORMATIVAS Y METODOLOGÍAS DOCENTES

Véase 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)	VIRTUAL	35	35

y talleres de programación			
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 estrategias/metodologías de evaluación.			
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%%
Resolución de cuestionarios y tests de evaluación a través del Campus Virtual (Moodle)			20-40%%
Elaboración y/o presentación oral de trabajos de la asignatura			20-40%%
MEDIOS Y RECURSOS DIDÁCTICOS			
BIBLIOGRAFÍA			
<p>Frenkel y Smit, Understanding molecular simulation. Newman y Barkema, Monte Carlo Methods in Statistical Physics. Tuckerman, Statistical Mechanics: Theory and Molecular Simulation. Curso de David Kofke (http://www.eng.buffalo.edu/~kofke/ce530/). Curso MolSim (http://www.acmm.nl/molsim/molsim2015/index.html).</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>