

**Propuesta para el contenido temático del curso especializado de  
Dinámica Molecular con Mecánica Estadística  
(12 créditos, 96 h/semestre, 4 h/semana teoría, 2 h/semana práctica)**

Este curso es una “Actividad Académica Optativa”, tópico especializado, en la subárea de Física Molecular, dentro del campo de conocimiento de Física Cuántica, Atómica y Molecular. Deberá aportar a los alumnos los conceptos para poder abordar temas de investigación en la subárea, orientados a la descripción de la materia condensada en términos de los movimientos y de las interacciones de las moléculas que la componen. Podría compartirse con el CC de Materia Condensada y Nanociencias.

**Unidades:**

- 1. La mecánica clásica (10 h, semana 1)**
- 2. Los fundamentos teóricos de la mecánica estadística clásica.**
- 3. El *ensemble* microcanónico (N, V, E) y la introducción a la dinámica molecular.**
- 4. El *ensemble* canónico (N, V, T) y el control de la temperatura en la dinámica molecular.**
- 5. Los *ensembles* isobárico-isotérmico (N, P, T) e isobárico-isoentálpico (N, P, H). El control de la presión en dinámica molecular.**
- 6. El *ensemble* gran canónico ( $\mu$ , V, T). El control del potencial químico en la dinámica molecular.**
- 7. El método de Monte Carlo y su utilidad.**
- 8. Cálculos de energía libre.**

**Contenido por unidades:**

**1. La mecánica clásica.**

- 1.1 Introducción.
- 1.2 Las leyes de movimiento de Newton.
- 1.3 El espacio fase: la visualización del movimiento clásico.
- 1.4 La formulación Lagrangiana de la mecánica clásica: una herramienta general para trabajar con las leyes de Newton.
- 1.5 Las transformaciones de Legendre.
- 1.6 Los ímpetus generalizados y la formulación Hamiltoniana de la mecánica clásica.
- 1.7 Un modelo simple y clásico de polímero.
- 1.8 La integral de acción.
- 1.9 La mecánica Lagrangiana y los sistemas con constricciones.
- 1.10 El principio de Gauss de la mínima constricción.
- 1.11 El movimiento del cuerpo rígido: los ángulos de Euler y los cuaterniones.
- 1.12 Los sistemas no Hamiltonianos.

**2. Los fundamentos teóricos de la mecánica estadística clásica.**

- 2.1 Visión general.
- 2.2 Las leyes de la termodinámica.
- 2.3 El concepto de un *ensemble*.
- 2.4 Los volúmenes en el espacio fase y el Teorema de Liouville.
- 2.5 La función de distribución de un *ensemble* y la ecuación de Liouville.
- 2.6 Las soluciones de equilibrio de la ecuación de Liouville.

**3. El *ensemble* microcanónico (N, V, E) y la introducción a la dinámica molecular.**

- 3.1 Visión general.

- 3.2 Termodinámica básica, la relación de Boltzmann y la función de partición del *ensemble* microcanónico.
- 3.3 El teorema del virial clásico.
- 3.4 Las condiciones para el equilibrio térmico.
- 3.5 La partícula libre y el gas ideal.
- 3.6 El oscilador armónico y los baños armónicos.
- 3.7 Introducción a la dinámica molecular.
- 3.8 La integración de las ecuaciones de movimiento con métodos de diferencias finitas.
- 3.9 Sistemas sujetos a constricciones holonómicas.
- 3.10 El operador de evolución temporal clásico y los integradores numéricos.
- 3.11 La integración en múltiples escalas de tiempo.
- 3.12 La integración simpléctica de los cuaterniones.
- 3.13 Los Hamiltonianos exactamente conservados dependientes del paso de tiempo (time step).
- 3.14 Ejemplos ilustrativos de simulaciones por dinámica molecular.

#### **4. El *ensemble* canónico (N, V, T) y el control de la temperatura en la dinámica molecular.**

- 4.1 Introducción: un conjunto diferente de condiciones experimentales.
- 4.2 La termodinámica del *ensemble* canónico.
- 4.3 La distribución en el espacio fase y la función de partición canónicas.
- 4.4 Las fluctuaciones de la energía en el *ensemble* canónico.
- 4.5 Algunos ejemplos simples en el *ensemble* canónico.
- 4.6 La estructura y la termodinámica de los gases reales y de los líquidos a partir de funciones de distribución espacial.
- 4.7 La teoría de perturbaciones y la ecuación de van der Waals.
- 4.8 La dinámica molecular en el *ensemble* canónico: la formulación Hamiltoniana en un espacio fase extendido.
- 4.9 La mecánica estadística no Hamiltoniana clásica.
- 4.10 Las cadenas de Nosé-Hoover.
- 4.11 La integración de las ecuaciones de las cadenas de Nosé-Hoover.
- 4.12 El *ensemble* isocinético: una variación simple del *ensemble* canónico.
- 4.13 La aplicación de la dinámica molecular canónica para estudiar la estructura de los líquidos.

#### **5. Los *ensembles* isobárico-isotérmico (N, P, T) e isobárico-isoentálpico (N, P, H). El control de la presión en dinámica molecular.**

- 5.1 ¿Por qué usar presión constante?
- 5.2 La termodinámica de los *ensembles* isobáricos.
- 5.3 Las distribuciones en el espacio fase y las funciones de partición isobáricas.
- 5.4 Los teoremas del virial del trabajo y la presión.
- 5.5 Un gas ideal en el *ensemble* isobárico isotérmico (N, V, T).
- 5.6 Una extensión del *ensemble* isobárico-isotérmico: fluctuaciones anisotrópicas de una celda.
- 5.7 La derivación de un estimador del tensor de la presión a partir de la función de partición canónica.
- 5.8 La dinámica molecular en el *ensemble* isobárico-isoentálpico (N, P, H).
- 5.9 La dinámica molecular en el *ensemble* isobárico-isotérmico (N, P, T): I. Fluctuaciones de volumen isotrópicas.
- 5.10 La dinámica molecular en el *ensemble* isobárico-isotérmico (N, P, T): II. Fluctuaciones anisotrópicas de la celda.
- 5.11 Los viriales atómico y molecular.
- 5.12 La integración de las ecuaciones de movimiento MTK.
- 5.13 El *ensemble* isobárico isotérmico con constricciones: el algoritmo ROLL.

## **6. El *ensemble* gran canónico ( $\mu, V, T$ ). El control del potencial químico en la dinámica molecular.**

- 6.1 Introducción: la necesidad de otro ensemble más.
- 6.2 El teorema de Euler.
- 6.3 La termodinámica del ensemble gran canónico.
- 6.4 El espacio fase y la función de partición gran canónicos.
- 6.5 Ilustración del ensemble gran canónico con el gas ideal.
- 6.6 Las fluctuaciones del número de partículas en el ensemble gran canónico.

## **7. El método de Monte Carlo y su utilidad.**

- 7.1 Introducción al método de Monte Carlo.
- 7.2 El teorema del límite central.
- 7.3 Las distribuciones para muestreo.
- 7.4 El Monte Carlo híbrido.
- 7.5 El Monte Carlo con intercambio de réplicas.
- 7.6 El muestreo de Wang-Landau.
- 7.7 El muestreo en una trayectoria de transición y el ensemble de la trayectoria de transición.

## **8. Cálculos de energía libre.**

- 8.1 La teoría de perturbaciones de la energía libre.
- 8.2 Encendido intermitente (switching) adiabático y la integración termodinámica.
- 8.3 La dinámica adiabática de la energía libre.
- 8.4 La igualdad de Jarzynski y los métodos desequilibrados (nonequilibrium).
- 8.5 El problema de los eventos raros.
- 8.6 Las coordenadas de reacción.
- 8.7 La aproximación con el ensemble de la *Luna Azul* (Blue Moon).
- 8.8 El muestreo de sombrilla (umbrella sampling) y los métodos de histograma ponderado.
- 8.9 El muestreo de Wang-Landau.
- 8.10 La dinámica adiabática.
- 8.11 La metadinámica.
- 8.12 El concepto de *committor*, la distribución del *committor* y la prueba del histograma.