



UNIVERSIDAD DE GUADALAJARA

Centro Universitario de los Valles
División de Estudios Científicos y Tecnológicos
INGENIERÍA EN DISEÑO MOLECULAR DE MATERIALES

1. INFORMACIÓN DEL CURSO

Nombre: Modelación molecular	Número de créditos:	Prerrequisitos: Ninguno
Departamento: Ciencias Naturales y Exactas	Tipo: Clase	Nivel: Básica
Horas teoría: 48	Horas práctica: 32	Total de horas por cada semestre: 80

2. DESCRIPCIÓN

Objetivo general

Comprender los conceptos básicos de la dinámica molecular, Monte Carlo libre, Determinación de energía y transición métodos (cinético).

Contenido temático sintético

Temas

- 1.- Método de Monte Carlos
- 2.-Dinámica Molecular
- 3.-Métodos de optimización
- 4.-Determinación de energía libre
- 5.-Métodos de localización de estados de transición.

Modalidades de enseñanza aprendizaje

Cátedra.

Modalidad de evaluación

Exámenes.
Proyectos.
Tareas.

Competencia a desarrollar

El alumno aplicará los fundamentos de la modelación molecular para el diseño de estructuras y materiales.

Campo de aplicación profesional

Diseño y desarrollo de materiales con propiedades de manipulación según necesidades que se presenten.

3. BIBLIOGRAFÍA

1. Peña Sánchez de Rivera, Daniel (2001). «Deducción de distribuciones: el método de Monte Carlo», en *Fundamentos de Estadística*. Madrid: Alianza Editorial. [ISBN 84-206-8696-4](#)
2. M. Sóbol. *Métodos de Montecarlo*. Lecciones populares de Matemáticas. Editorial Mir (1976).
3. B. P. Demidowitsch. I. A. Maron, E. S. Schuwallowa. *Métodos numéricos de análisis*. Editorial Paraninfo (1980).
4. Feynman, Richard (1963). *Lectures on Physics*.
5. Smith, S. J.; Sutcliffe B. T., (1997). "The development of Computational Chemistry in the United Kingdom". *Reviews in Computational Chemistry* **70**: 271 - 316.
6. Schaefer, Henry F. III (1972). *The electronic structure of atoms and molecules*. Reading, Massachusetts: Addison-Wesley Publishing Co., 146.
7. Boys, S. F.; Cook G. B., Reeves C. M., Shavitt, I. (1956). "Automatic fundamental calculations of molecular structure". *Nature* **178** (2): 1207.
8. Richards, W. G.; Walker T. E. H and Hinkley R. K. (1971). *A bibliography of ab initio molecular wave functions*.

Oxford: Clarendon Press.

9. Preuss, H. (1968). *International Journal of Quantum Chemistry* 2: 651.