

Curso Especial

Modelamiento Matemático y Numérico de Líquidos Simples

Datos básicos

Semestre	Horas de teoría	Horas de práctica	Horas trabajo adicional estudiante	Créditos
Ambos	3	2	5	10

Objetivos	Al finalizar el curso el estudiante será capaz de modelar y describir numéricamente las propiedades estáticas y dinámicas de líquidos simples modelo, los cuales son utilizados ampliamente para describir procesos naturales en sistemas de materia condensada suave, física, química, biología, fisico-química, y biofísica. Esta materia es autocontenida y no requiere seriación.
Temario	<ol style="list-style-type: none">1. Mecánica Estadística: promedios temporales, ensambles, y funciones de distribución de muchas partículas.2. Propiedades estáticas de líquidos (termodinámica y estructura): un fluido en un campo externo, funcionales y derivación funcional, teoría de funcionales de la densidad clásica, funciones de correlación.3. Teorías de funciones de distribución: factor de estructura estático, la jerarquía de YBG, expansiones funcionales y ecuaciones integrales.4. Fluidos inhomogéneos: líquidos en interfaces, funcionales de la energía libre aproximados, la teoría de la medida fundamental.5. Líquidos Iónicos: clases y modelos de líquidos iónicos, apantallamiento y ordenamiento de la carga, teorías de ecuaciones integrales, dinámica microscópica de sales fundidas, la doble capa eléctrica, e interacciones efectivas entre partículas coloidales.6. Simulaciones por computadora: dinámica molecular, Monte Carlo, dinámica Browniana, dinámica de partículas disipativas.7. Propiedades dinámicas de líquidos: desplazamiento cuadrático medio, función de autocorrelación de la velocidad y la autodifusión, correlaciones en el tiempo y el espacio.

Universidad Autónoma de San Luis Potosí
Posgrado en Ciencias Interdisciplinarias
Facultad de Ciencias

Métodos y prácticas	Métodos	Clases presenciales de maestro y estudiantes. Exposición del maestro con apoyo de recursos computacionales y audiovisuales. Lectura de libros, artículos, y desarrollo de proyectos por parte de los estudiantes.
	Prácticas	Resolución de ejercicios y programación en Fortran 2000, Fortran 95, C, C++, Java, o Python de tareas y proyectos.
Mecanismos y procedimientos de evaluación	Exámenes, tareas y proyectos	El curso será evaluado mediante 10% de exposiciones, 25% de tareas, 40% exámenes y 25% correspondiente al desarrollo de proyectos que involucren la implementación de código de computadora.
Bibliografía básica de referencia	<ol style="list-style-type: none"> 1. Theory of simple liquids with applications to Soft Matter 4a Ed., J.-P. Hansen e I. R. McDonald, Academic Press 2013. 2. Statistical Mechanics: Theory and Molecular Simulation, M. Tuckerman, Oxford University Press, 2010. 3. Numerical Simulation in Molecular Dynamics: Numerics, Algorithms, Parallelization, Applications : Griebel, S. Knapek, G. Y Zumbusch, Springer, 2007. 	
Elaboración y Fecha	Guillermo Iván Guerrero García, 3 de julio de 2015.	