



Asignatura: Mecánica Estadística y Aplicaciones en Simulación  
Código: 32524  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 5

## 1. ASIGNATURA / **COURSE TITLE**

Mecánica Estadística y aplicaciones en simulación /  
[Statistical Mechanics and Applications on Simulations](#)

### 1.1. Código / **Course number**

32524

### 1.2. Materia / **Content area**

Módulo 1. Fundamentos / [Module 1. Fundamentals Course](#)

### 1.3. Tipo / **Course type**

Obligatoria / [Compulsory subject](#)

### 1.4. Nivel / **Course level**

Máster / [Master](#)

### 1.5. Curso / **Year**

1º / [1<sup>st</sup>](#)

### 1.6. Semestre / **Semester**

Anual / [Anual](#)

### 1.7. Número de créditos / **Credit allotment**

5 créditos ECTS / [5 ECTS credits](#)

### 1.8. Requisitos previos / **Prerequisites**

No hay requisitos previos / [There are no previous prerequisites](#)



Asignatura: Mecánica Estadística y Aplicaciones en Simulación  
Código: 32524  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 5

## 1.9. Requisitos mínimos de asistencia a las sesiones presenciales / **Minimum attendance requirement**

La asistencia a las clases es obligatoria / [Attendance is mandatory](#)

## 1.10. Datos del equipo docente / **Faculty data**

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Martín Navarro, María Elena (Coordinadora)  
Departamento de Ingeniería Química y Química Física / [Department of Chemical engineering and Physical Chemistry](#)  
Universidad de Extremadura / [University of Extremadura](#)  
Teléfono / **Phone**: +34 924289300 Ext: 86125  
Correo electrónico/**Email**: [memartin@unex.es](mailto:memartin@unex.es)  
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Corchado Martín-Romo, José Carlos  
Departamento de Ingeniería Química y Química Física / [Department of Chemical engineering and Physical Chemistry](#)  
Universidad de Extremadura / [University of Extremadura](#)  
Teléfono / **Phone**: 34 924289300 Ext: 89787  
Correo electrónico/**Email**: [corchado@unex.es](mailto:corchado@unex.es)  
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email

Docente(s)/**Lecturer(s)**: Sayós, Ramón  
Departamento de Ciencia de Materiales y Química Física / [Department of Materials Science and Chemical Physics](#)  
Universidad de Barcelona / [University of Barcelona](#)  
Correo electrónico/**Email**: [r.sayos@ub.edu](mailto:r.sayos@ub.edu)  
Página web/**Website**: <http://www.ub.edu/rsogroup>  
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: contact by email

## 1.11. Objetivos del curso / **Course objectives**

### 1.11a. Resultados del 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 desee estudiar. También debe



Asignatura: Mecánica Estadística y Aplicaciones en Simulación  
 Código: 32524  
 Centro: Facultad de Ciencias  
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
 Nivel: Máster  
 Tipo: Formación Obligatoria  
 N° de créditos: 5

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., dodedano/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).

#### 1.11b. Competencias

Estos resultados del aprendizaje contribuyen a la adquisición de las siguientes competencias del curso:

#### **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.



Asignatura: Mecánica Estadística y Aplicaciones en Simulación  
Código: 32524  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 5

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.

#### **1.11a. Learning objectives**

This course is organized in two parts. The first part is dedicated to the foundations of Statistical Mechanics and the second part is devoted to the simulation applications.

After completing the course, the students should understand the central ideas of Statistical Mechanics, formulated on the basis of statistical ensembles. They should understand the main features of the most important ensembles (microcanonical, canonical and grand canonical), and should be able to select the most appropriate ensemble depending on the chemical system that is under investigation. The student should also understand the differences between Fermi-Dirac and Bose-Einstein statistics, as well as the conditions upon which the quantum statistics converge to the classical limit. The student should know how to calculate partition functions and



Asignatura: Mecánica Estadística y Aplicaciones en Simulación  
 Código: 32524  
 Centro: Facultad de Ciencias  
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
 Nivel: Máster  
 Tipo: Formación Obligatoria  
 N° de créditos: 5

apply quantum and classical statistics to ideal systems of interest in chemistry. The student should understand the differences between real and ideal systems, by analysing the main characteristics of real gases and condensed phases. Moreover, the statistical mechanics of non-equilibrium systems will be treated. Finally and due to the difficulty of finding analytical solutions, simulation methods such as MonteCarlo will be studied to obtain numerical solutions to complex problems.

As applications, students will calculate, making use of the information obtained from first principles through Quantum Chemistry calculation programs (e.g., GAMESS, GAUSSIAN,..) partition functions and enthalpic and entropic corrections to free energy differences in different situations of chemical interest (e.g., thermodynamic equilibrium constants of a gas phase reaction).

In addition, in other applications, different macroscopic properties will be determined by means of simulations with Molecular Dynamics or Monte Carlo methods, using the appropriate force fields to describe the molecular interactions (e.g., TraPPE, GROMOS,..). Examples of some of the applications to be carried out: 1) calculation of a liquid-vapor surface tension (e.g., ethanol), 2) calculation of a liquid-liquid interfacial tension (e.g., dodecane/water), 3 ) calculation of a diffusion coefficient in a gas mixture (e.g., N<sub>2</sub> and O<sub>2</sub> in air), 4) calculation of an adsorption isotherm for a gas/solid system (e.g., CO<sub>2</sub> on a zeolite).

#### 1.11b. Skills

These learning objectives contribute to provide the following skills for the students:

##### **BASIC AND GENERAL SKILLS**

CB6 - Students possess and understand knowledge that provides a basis or opportunity to be original in the development and/or application of ideas, often in a research context.

CB7 - Students know how to apply the acquired knowledge and their problem solving capacity in new or little known environments within broader (or multidisciplinary) contexts related to their area of study.

CB8 - Students are able to integrate knowledge and face the complexity of making judgments from information that, incomplete or limited, includes reflections on social and ethical responsibilities linked to the application of their knowledge and judgments.

CB9 - Students know how to communicate their conclusions and the knowledge and reasons that support them to specialized and non-specialized audiences in a clear and unambiguous way.

CB10 - Students possess the learning skills that allow them to continue studying in a way that will be self-directed or autonomous.



Asignatura: Mecánica Estadística y Aplicaciones en Simulación  
Código: 32524  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 5

CG01 - Students are able to foster, in academic and professional contexts, technological and scientific progress within a society based on knowledge and respect for: a) fundamental rights and equal opportunities between men and women, b) The principles of equal opportunities and universal accessibility for persons with disabilities, and c) the values of a culture of peace and democratic values.

CG02 - Students are able to solve problems and make decisions of any kind under the commitment to the defense and practice of equality policies.

#### CROSS-COMPREHENSIVE SKILLS

CT01 - Students are able to adapt their selves to different cultural environments by demonstrating that they are able to respond to change with flexibility.

#### SPECIFIC SKILLS

CE01- Students demonstrate their knowledge and understanding of the facts applying concepts, principles and theories related to the Theoretical Chemistry and Computational Modeling.

CE04 - Students understand the theoretical and practical bases of computational techniques with which they can analyze the electronic, morphological and structural structure of a compound and interpret the results adequately.

CE09 - Students understand the basis of Statistical Mechanics formulated from the collectivities.

CE10 - Students know how to calculate partition functions and apply quantum and classical statistics to the ideal systems of interest in Chemistry.

## 1.12. Contenidos del programa / Course contents

### 1- Mecánica Estadística

- Colectivos y postulados de la mecánica estadística.
- Colectivos microcanónico, canónico y grancanónico.
- 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.



Asignatura: Mecánica Estadística y Aplicaciones en Simulación  
Código: 32524  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 5

- Cálculo de una tensión interfacial líquido-líquido.
- Cálculo de una isoterma de adsorción tipo gas/sólido absorbente.

### 1- Statistical Mechanics

- Ensembles and postulates of statistical mechanics.
- Microcanonical, canonical and grand canonical ensembles.
- Fermi-Dirac, Bose-Einstein and Boltzmann statistics.
- Classical statistical mechanics. Applications to ideal systems: ideal gases, ideal gas of photons, phonons, electrons in metals.
- Systems of interacting particles: dilute real gases, second virial coefficient, van der Waals equation.
- Statistical mechanics of non-equilibrium systems.
- MonteCarlo simulations.

### 2- Applications

- Calculation of molecular partition functions and macroscopic properties for a gas-phase reaction ( $\Delta U$ ,  $\Delta S$ ,  $\Delta G$ ,  $K$ , ..) at various temperatures.
- Calculation of a liquid-vapor surface tension.
- Calculation of a liquid-liquid interfacial tension.

## 1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

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. Métodos docentes / Teaching methodology

**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.



Asignatura: Mecánica Estadística y Aplicaciones en Simulación  
 Código: 32524  
 Centro: Facultad de Ciencias  
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
 Nivel: Máster  
 Tipo: Formación Obligatoria  
 N° de créditos: 5

**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..

**Lecture:** The Professor will deliver face-to-face, or, online video lectures about the theoretical contents of the course during two-hour sessions. The presentations will be based on the different materials available at the Moodle platform.

**Network teaching:** All the tools available at the Moodle website (<https://posgrado.uam.es>) will be used (uploading of teaching materials, utilization of work team strategies, wiki, blogs, e-mail, etc.).

**Seminars:** After the lecturing period, seminars between the Professor and the students are scheduled in order to apply the theoretical content to problem solving and to analyze the potential problems and difficulties in using the various methodologies as well as to supervise the preparation of the required reports. .

**Tutoring sessions:** The professor can organize either individual or group tutoring sessions about particular topics and questions raised by students.

**Computational laboratory.** In several practical sessions the students will make calculations on different macroscopic properties of chemical interest, applying the theoretical knowledge of Statistical Mechanics previously explained. .

### 3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

**Presencial:**

Clases teóricas en aula / aula virtual .....25 horas  
 Laboratorio computacional .....10 horas





Asignatura: Mecánica Estadística y Aplicaciones en Simulación  
 Código: 32524  
 Centro: Facultad de Ciencias  
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
 Nivel: Máster  
 Tipo: Formación Obligatoria  
 N° de créditos: 5

#### No Presencial:

Estudio autónomo individual o en grupo.....40 horas  
 Preparación de seminarios.....20 horas  
 Elaboración de una memoria con ejercicios planteados en clase.....30 horas

TOTAL (5 ECTS \* 25 horas/ECTS).....125 horas

#### Contact hours:

Theoretical lessons in classroom / virtual classroom .....25 hours  
 Computational laboratory .....10 hours

#### Independent study hours:

self-study or group study .....40 hours  
 Preparation of seminars, assigned tasks and study.....20 hours  
 Elaboration of a memory based on the exercises proposed in class.....30 hours

TOTAL (5 ECTS \* 25 hours/ECTS).....125 hours

## 4. Métodos de evaluación y porcentaje en la calificación final / Evaluation procedures and weight of components in the final grade

### Convocatoria ordinaria

Los conocimientos adquiridos por el estudiante serán evaluados a lo largo de todo el curso, intentando que el estudiante avance de forma regular y constante en la asimilación de los contenidos de la asignatura.

La nota final de la asignatura se basará en los ejercicios, trabajos y discusión de los mismos que se irá realizando durante el curso. Dichos trabajos se puntuarán en base a los siguientes porcentajes:

- 60 % Realización de ejercicios relacionados con la asignatura,
- 40 % Finalización de una de las prácticas realizadas en clase y entrega de un informe crítico sobre la misma.

### 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,



Asignatura: Mecánica Estadística y Aplicaciones en Simulación  
Código: 32524  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Obligatoria  
Nº de créditos: 5

- 30 % realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.

### Ordinary assessment

The knowledge acquired by the student will be evaluated along the course. The educational model to follow will emphasize a continuous effort and advance in training and learning.

The final student mark will be based on exercises that must be done during the course. The next criteria will be followed for assessment of student exercises:

- 60% Realization of exercises related to the subject
- 40% Completion of one of the practical sessions carried out in class, and delivery of a critical report on it

### Extraordinary assessment

The student will have to face a final exam, including both theory and practical exercises. The latter consists in an individual work that the student will have to do with the programs used during the course. The student mark will be obtained from:

- 70% from the final exam,
- 30% from the individual work.

## 5. Cronograma\* / Course calendar

Por favor, comprobar el horario oficial publicado en la página web del Máster.  
Please, check the official schedule posted on the master website.

\*Este cronograma tiene carácter orientativo

\*This course calendar is orientative