



**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA
UNIDAD IZTAPALAPA
DEPARTAMENTO DE QUÍMICA**



14 ENE 2025

RECIBIDO
DIVISIÓN C.B.I. DIRECCIÓN

DQ.0002.2025

Enero 13, 2025

Dr. Román Linares Romero
Presidente del Consejo Divisional
de la División de Ciencias Básicas e Ingeniería
PRESENTE

A través de este medio le solicito incluir en el orden del día de la próxima sesión del Consejo Divisional el informe sabático del Profesor José Reyes Alejandro Ramírez, del Área Académica de Química Cuántica. Dicho informe sabático comprende el período de 12 meses a partir del 10 de noviembre de 2023.

Agradezco su atención a esta solicitud y le envío un cordial saludo.

Atentamente
Casa abierta al tiempo



Dr. Jorge Garza Olguín
Jefe del Departamento de Química

UNIDAD IZTAPALAPA

División de Ciencias Básicas e Ingeniería

Departamento de Química

Ave. Ferrocarril San Rafael Atlixco 186. Col. Leyes de Reforma 1A Sección. Iztapalapa C.P. 09310. CdMx, México.

Apartado Postal 55-534.



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

CONSEJO DIVISIONAL DE CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERIA

INFORME DE PERÍODO SABÁTICO

DATOS GENERALES

Nombre del profesor: José Reyes Alejandro Ramírez N° empleado: 11955
Departamento: Química Área: Química Cuántica
Teléfono particular: [REDACTED] Extensión UAM-I: 4675 E-mail: [REDACTED]@xanum.uam.mx

DATOS DEL PERÍODO SABÁTICO SOLICITADO

N° meses solicitados: 12 Fecha de inicio: 06/11/2023 Fecha de terminación: 05/11/2024
Institución donde se realizará: _____
Depto., Laboratorio, etc.: UAM-Iztapalapa. R-144
Domicilio de la institución: Av. Ferrocarril San Rafael Atlixco 186. Iztapalapa. C.P. 09310, CdMx
Teléfono: [REDACTED] Fax: _____ E-mail: [REDACTED]@xanum.uam.mx

OBJETIVOS DEL PERÍODO SABÁTICO

1. Desarrollar investigación de simulación molecular para mejorar campos de fuerza de fluidos polares e iónicos
2. Desarrollar material de apoyo en las UEA Fisicoquímica V y Lab. de Fisicoquímica computacional
3. Organizar el 13o Taller de DM y el 14th Meeting on Molecular Simulations
4. Visita de trabajo al Dr. William R. Smith de la Universidad de Guelph Ontario, Canadá

METAS ALCANZADAS EN EL PERÍODO SABÁTICO

- | | | |
|---|---|---|
| <input type="checkbox"/> Memorias in extenso en libro de resúmenes* | <input checked="" type="checkbox"/> Artículos de investigación en revista indexada* | <input type="checkbox"/> Presentaciones en congresos |
| <input type="checkbox"/> Libros o capítulos de libros | <input type="checkbox"/> Grado | <input type="checkbox"/> % Avance de estudios de posgrado |
| <input type="checkbox"/> Otros (especifique): <u>Graduación de una alumna de Maestría</u> | | |

* Indicar en anexo si se trata de trabajo publicado, aceptado o sometido

TIPO DE ACTIVIDADES ACADÉMICAS DESARROLLADAS

(Indique aquellas relacionadas con las actividades desarrolladas)

<input checked="" type="checkbox"/> Investigación	<input type="checkbox"/> Docencia	<input checked="" type="checkbox"/> Difusión
<input checked="" type="checkbox"/> Formación académica	<input type="checkbox"/> Formación profesional	<input type="checkbox"/> Entrenamiento técnico
<input type="checkbox"/> Otros (especifique): _____		

RESUMEN DEL PLAN DE ACTIVIDADES ACADÉMICAS DESARROLLADAS


(El llenado de esta sección no sustituye el informe detallado de actividades)

- A. Seis artículos de investigación publicadas en revistas indizadas con colaboradores indicados en el plan propuesto.
- B. Un artículo enviado a la revista Journal of Molecular Liquids con colaboradores indicados en el plan propuesto
- C. Graduación de una alumna de Maestría de la Universidad del Papaloapan en coasesoría
- D. Visita de trabajo al grupo del Dr. William Smith de la Universidad de Guelph Ontario, Canada.
- E. Elaboración de material de apoyo de las UEA Físicoquímica V y Laboratorio de Físicoquímica Computacional
- F. Co-organizador del 13o Taller de Dinámica Molecular y del 14th Meeting on Molecular Simulations
- G. Aceptado como Investigación Nacional Emérito en el SNI a partir del 2025.

PARA USO DEL JEFE DE DEPARTAMENTO

Después de haber evaluado el informe detallado de actividades del período sabático del interesado según los lineamientos establecidos para tal efecto; informo al Consejo Divisional que:

- Los objetivos SE cumplieron satisfactoriamente
- Los objetivos SE cumplieron parcialmente
- Los objetivos NO se cumplieron
- NO se cumplió el propósito del sabático


Firma del Jefe de Departamento

13/01/2025
Fecha

PARA USO DEL CONSEJO DIVISIONAL

El Consejo Divisional, en su Sesión No. _____ del _____ sobre el Período sabático del interesado acordó que:

- Los objetivos SE cumplieron satisfactoriamente
- Los objetivos SE cumplieron parcialmente
- Los objetivos NO se cumplieron
- NO se cumplió el propósito del sabático

Secretario del Consejo Divisional

*Además de este formato-resumen, el interesado deberá entregar su Informe detallado de actividades junto con la documentación probatoria correspondiente.

10 de agosto del 2023.

PLAN DE ACTIVIDADES

Periodo Sabático del 06 de noviembre del 2023 al 05 de noviembre del 2024.

Investigación. Realizaré estudios de simulación molecular y métodos de estructura electrónica en tres temas para el desarrollo de campos de fuerza con el fin de:

1. Incrementar la solubilidad de ingredientes farmacéuticos activos (IFAs) en soluciones acuosas que contengan solventes polares. En particular IFAs que tienen potencial antiviral en el estudio del COVID. El estudio se hará en colaboración con el Dr. Frank José Salas, posdoctorado del Conacyt.
2. Mejorar las propiedades de transporte del ion litio en electrolitos usados en dispositivos para almacenar energía. En particular, mezclas de solventes iónicos como el TFSI y polares como los carbonatos de propileno y éteres lineales. También de sales que contienen boratos. Se hará en colaboración con el Dr. Edgar Núñez, Cátedra Conacyt, y con el grupo de electroquímica de la UAM-Iztapalapa que dirige el Dr. Ignacio González.
3. Extraer compuestos nitrogenados y sulfurados de gasolina y diesel mediante solventes polares y iónicos. Se hará en colaboración con el Dr. Edgar Núñez.



Haré al menos una visita de trabajo al Dr. Mark Tuckerman de la Universidad de Nueva York, Estados Unidos, para aprender y aplicar la metodología de inteligencia artificial en el desarrollo de campos de fuerza de solventes polares y iónicos.

Publicaré tres artículos de investigación en revistas indizadas en los temas antes mencionados

Material de apoyo a UEA. Usaré herramientas de inteligencia artificial para desarrollar material de apoyo en Fisicoquímica V y Laboratorio de Fisicoquímica Computacional.

Difusión y promoción de la cultura. Organizaré el Taller de Dinámica Molecular a nivel nacional y el Meeting on Molecular Simulations a nivel internacional.

Atentamente


Dr. José Reyes Alejandro Ramírez
Profesor del Depto. De Química
UAM-Iztapalapa
Correo: @xanum.uam.mx

ANEXO SOBRE EL INFORME SABÁTICO

Dr. José Reyes Alejandro Ramírez

PLAN PROPUESTO

A. Investigación. Realizaré estudios de simulación molecular y métodos de estructura electrónica en tres temas para el desarrollo de campos de fuerza con el fin de:

1. Incrementar la solubilidad de ingredientes farmacéuticos activos (IFAs) en soluciones acuosas que contengan solventes polares. En particular IFAs que tienen potencial antiviral en el estudio del COVID. El estudio se hará en colaboración con el Dr. Frank José Salas, posdoctorado del Conacyt.
2. Mejorar las propiedades de transporte del ion litio en electrolitos usados en dispositivos para almacenar energía. En particular, mezclas de solventes iónicos como el TFSI y polares como los carbonatos de propileno y éteres lineales. También de sales que contienen boratos. Se hará en colaboración con el Dr. Edgar Núñez, Cátedra Conacyt, y con el grupo de electroquímica de la UAM-Iztapalapa que dirige el Dr. Ignacio González.
3. Extraer compuestos nitrogenados y sulfurados de gasolina y diesel mediante solventes polares y iónicos. Se hará en colaboración con el Dr. Edgar Núñez.

Haré al menos una visita de trabajo al Dr. Mark Tuckerman de la Universidad de Nueva York, Estados Unidos, para aprender y aplicar la metodología de inteligencia artificial en el desarrollo de campos de fuerza de solventes polares y iónicos.

Publicaré tres artículos de investigación en revistas indizadas en los temas antes mencionados

ACTIVIDADES REALIZADAS

Investigación. Desarrollé investigación con los métodos de simulación molecular y estructura electrónica para mejorar campos de fuerzas en sistemas polares y iónicos.

Publiqué los siguientes 6 artículos de investigación en revistas indizadas con colaboradores indicados en el plan propuesto

1. Efficient search of molecular interaction parameters for polar liquids
Javier Pozos-García, Edgar Núñez-Rojas, José Luis Quiroz, Adriana Pérez Espinosa and José Alejandro
Molecular Physics, **122**, Issue 19-20 (2024). <https://doi.org/10.1080/00268976.2024.2343386>

2. Extraction of N- and S- compounds in gasoline and diesel from ionic liquids: A molecular dynamics study
Edgar Núñez-Rojas, Karen González Alarcón and José Alejandro
Journal of Molecular Liquids, **397**, 124102 (2024).

3.A Molecular Mechanics Implementation of the Cyclic Cluster Model

J. D. Samaniego-Rojas, R. Gaumard, J. Alejandro, T. Mineva, G. Geudtner and A.M. Koster
Zeitschrift für Naturforschung B, **79**, 201-213 (2024).

4. Absorption of active pharmaceutical ingredients in a protein/lipid bilayer by dissipative particle dynamics

M. Ferrer-Guadalupe, J. Duarte-Mendoza, F. Noé Mendoza-Ambrosio and José Alejandro
Molecular Physics. doi:10.1080/00268976.2024.2394624 (2024)

5.ADCH α -I population analysis and constrained dipole moment density functional theory in force fields for molecular simulations

J. Carmona-Espíndola, V. García-Melgarejo, E. Núñez-Rojas, S. Mendoza, A. García, J. L. Gázquez and José Alejandro
Journal of Chemical Physics, **161**, 144103 (2024)

6. Fifty years of molecular simulations at UAM and in Mexico

E. Núñez-Rojas, AP de la Luz, H Saint-Martin, J Alejandro
Journal of the Mexican Chemical Society **68** (4), 717-742 (2024)

Artículo de investigación enviado con colaboradores indicados en el plan propuesto

1.Parameterization of phenol, benzoic acid and phenolic acids to obtain their solubility in water

Frank José Salas, Edgar Núñez-Rojas, and José Alejandro
Enviado a Journal of Molecular Liquids (2024)

Visita de Trabajo

No se pudo realizar la visita de trabajo al grupo del Dr. Mark Tuckerman de la Universidad de Nueva York, Estados Unidos.

En su lugar hice una estancia de un mes al grupo de investigación del Dr. William Smith de la Universidad de Guelph en Ontario, Canadá. El Dr. Smith pagó los gastos de hospedaje y alimentación de todo el mes de mayo. Colaboré en el proyecto *Captura de CO₂ por medio de alcanolaminas como solventes polares y iónicos*. El proyecto usa información de simulación molecular, estructura electrónica y termodinámica clásica para obtener el Pka de reacciones en donde participan estos solventes y el CO₂.

PLAN PROPUESTO

B. Difusión y promoción de la cultura. Organizaré el Taller de Dinámica Molecular a nivel nacional y el Meeting on Molecular Simulations a nivel internacional.

ACTIVIDADES REALIZADAS

Co-organicé el 13° Taller de Dinámica Molecular del 26 al 30 de agosto del 2024 en modalidad virtual.

Co-organicé el 14th Meeting on Molecular Simulations del 03 al 05 de octubre del 2024 en la Casa de la Primera Imprenta de América en la Ciudad de México.

OTRAS ACTIVIDADES

Formación de recursos humanos.

Codirector de la alumna de Maestría **Martha Ferrer Guadalupe** de la Universidad del Papaloapan, Unidad Tuxtepec. El codirector interno fue el Dr. Francisco Noé Mendoza Ambrozio y el título de la tesis fue *Estudio del eriodictiol como ingrediente farmacéutico activo, en agua, en bicapa lipídica y su afinidad con la lisozima como proteína modelo transmembrana*. El examen de grado se realizó el 21 de noviembre del 2024.

Posdoctorantes

Colaboré con el posdoctorante del Conacyt **Dr. Frank José Salas** sobre la simulación de ingredientes activos para mejorar su solubilidad en agua. El Dr. Salas ha trabajado en mi grupo de investigación durante los dos últimos años y ha sido aceptado para continuar su estancia posdoctoral por otros dos años.

Sistema Nacional de Investigadores

Aceptado como Investigador Nacional Emérito a partir del año 2025.

PLAN PROPUESTO

C. Material de apoyo a UEA. Usaré herramientas de inteligencia artificial para desarrollar material de apoyo en Fisicoquímica V y Laboratorio de Fisicoquímica Computacional.

ACTIVIDADES REALIZADAS

Tomé el curso Inteligencia Artificial en la Docencia: Usos y Aplicaciones impartido por VIRTUAMI en la UAM-Iztapalapa con una duración de 4 horas los días 20 y 27 de febrero del 2024. Esto me permitió entender los alcances de esta disciplina en la docencia. El material desarrollado permitirá analizar la conveniencia de modificar el contenido de las dos UEA cuando se discuta la actualización de los planes de estudio de la licenciatura. En el caso de la UEA Laboratorio de Fisicoquímica Computacional, cuyo programa contiene métodos de estructura electrónica y de simulación molecular, sólo se analiza el contenido de la segunda parte. Como un primer paso se usó **CHATGPT** para elaborar el material. La información proporcionada por CHATGPT se puede adaptar con facilidad para diseñar los nuevos programas de estas UEA.

#####

UEA Fisicoquímica V

Las preguntas están relacionadas con la forma de enseñar la termodinámica estadística del gas ideal, el uso de Mathematica para obtener funciones de partición y propiedades termodinámicas y el uso de programas de simulación molecular para entender el papel que juegan las fuerzas intermoleculares en las propiedades físicas. Se requieren conocimientos muy básicos de Mathematica y Linux para correr programas de simulación molecular. Esto se puede lograr si el profesor proporciona ejercicios e instructivos para correr dichos programas. El énfasis está en el uso de Mathematica y de los programas de simulación molecular. Basta con entender que los programas de simulación molecular requieren ecuaciones para describir de la interacción entre las moléculas y que generan la trayectoria de los átomos (posiciones y velocidades) en función del tiempo bajo condiciones controladas de temperatura y presión. No es necesario profundizar en la metodología. También se pregunta sobre como evaluar al alumno sobre termodinamica estadistica elemental.

La información está basada en las siguientes 5 preguntas:

Pregunta 1. ¿Como enseñar termodinámica estadística del gas ideal?

Pregunta 2. Usar Mathematica para obtener funciones de partición de gases ideales

Pregunta 3. Aplicar programas de simulacion molecular en la enseñanza de la temodinámica estadística.

Pregunta 4. ¿Como evaluar al alumno sobre termodinamica estadística elemental?

Pregunta 5. Bibliografía para entender termodinamica estadistica elemental

#####

Pregunta 1. ¿Como enseñar termodinámica estadística del gas ideal?

La **termodinámica estadística del gas ideal** es un campo fascinante que conecta las leyes macroscópicas de la termodinámica con el comportamiento microscópico de las partículas que componen un sistema. Enseñar esta área de la física puede ser desafiante, pero con un enfoque adecuado puedes hacer que los conceptos sean más accesibles y comprensibles para los estudiantes. Aquí te doy algunos pasos y sugerencias para enseñar la termodinámica estadística de un gas ideal de forma efectiva.

1. Revisión de conceptos previos

Antes de abordar la termodinámica estadística del gas ideal, asegúrate de que los estudiantes tengan una comprensión sólida de algunos conceptos básicos:

- **Termodinámica clásica:** Leyes de la termodinámica, funciones de estado (energía interna, entalpía, etc.), temperatura, presión, volumen, etc.
- **Mecánica clásica:** Conceptos como el movimiento de partículas, la energía cinética, y el concepto de partículas constituyentes en un gas.
- **Probabilidad y estadística:** Principios básicos de probabilidad, distribuciones de probabilidad (como la distribución de Maxwell-Boltzmann), y conceptos de sistemas de partículas.

2. Introducción al gas ideal desde la perspectiva estadística

Un gas ideal es un modelo donde las partículas no interactúan entre sí (excepto por colisiones elásticas) y el volumen de las partículas es insignificante comparado con el volumen total del gas. Para comenzar, es útil explicar:

- **Definición de gas ideal:** Las partículas son puntos materiales que se mueven al azar y obedecen las leyes de la mecánica clásica.
- **Supuestos básicos:**
 - El gas consta de un gran número de partículas (moléculas).
 - Las partículas se mueven de manera caótica.
 - Las interacciones entre partículas son despreciables.
 - Las colisiones entre partículas y entre partículas y las paredes son elásticas.

3. Conectar la termodinámica con la estadística

A continuación, debes presentar cómo se conecta la **termodinámica clásica** con la **estadística** para describir el comportamiento del gas:

- **Enfoque macroscópico (termodinámico):** El estado del gas está completamente caracterizado por variables como temperatura, presión y volumen, y se pueden utilizar las leyes de la termodinámica para describir su comportamiento.
- **Enfoque microscópico (estadístico):** La idea es que el comportamiento macroscópico del gas puede entenderse a partir del comportamiento microscópico de las partículas individuales. Aquí, se introduce la noción de distribuciones estadísticas de energía y velocidad.

4. Distribución de Maxwell-Boltzmann

La distribución de Maxwell-Boltzmann describe cómo se distribuye la energía cinética entre las partículas de un gas ideal. Es fundamental enseñar:

- **Forma de la distribución:** La distribución de velocidades de las partículas sigue una curva característica.
- **Relación con la temperatura:** La temperatura del gas está directamente relacionada con la energía cinética promedio de las partículas.
- **Fórmulas clave:**

$$f(v) = \left(\frac{m}{2\pi k_B T}\right)^{3/2} 4\pi v^2 \exp\left(-\frac{mv^2}{2k_B T}\right)$$

donde:

- $f(v)$ es la distribución de velocidades,
- m es la masa de las partículas,
- v es la velocidad de las partículas,
- k_B es la constante de Boltzmann,
- T es la temperatura.

5. Relación entre la energía interna y la temperatura

La energía interna de un gas ideal está relacionada con la energía cinética de sus partículas. El siguiente punto clave es:

- **Energía interna:** La energía total de un gas ideal es la suma de las energías cinéticas de todas sus partículas. Para un gas ideal monoatómico, la energía interna es:

$$U = \frac{3}{2} N k_B T$$

donde N es el número de partículas y T es la temperatura.

- **Capacidad calorífica:** La capacidad calorífica a volumen constante se obtiene como

$$C_V = 3Nk_B/2$$

6. Principio de la estadística de Maxwell-Boltzmann y el modelo de ensamble

El paso siguiente es introducir los conceptos de la **estadística de los ensambles**:

- **Ensamble microcanónico:** Describe un sistema aislado con energía constante.
- **Ensamble canónico:** Describe un sistema en contacto térmico con un reservorio a temperatura constante.
- **Ensamble grand canónico:** Describe un sistema que puede intercambiar partículas y energía con un reservorio.

Para un gas ideal, el ensamble **canónico** es el más relevante, ya que el gas está en contacto térmico con un reservorio térmico.

7. Entropía y la relación con la estadística

Es importante vincular el concepto de **entropía** con la estadística. Desde la termodinámica estadística:

- **Entropía:** Está relacionada con la probabilidad de los microestados de un sistema.

$$S = k_B \ln \Omega$$

donde Ω es el número de microestados posibles del sistema.

- **Relación con la temperatura:** La temperatura puede definirse en términos de la variación de la energía interna con la entropía:

$$\frac{1}{T} = \frac{\partial S}{\partial U}$$

8. Propiedades macroscópicas del gas ideal

Una vez que se haya cubierto la teoría básica, puedes pasar a las propiedades macroscópicas del gas ideal a partir de la estadística:

- **Ecuación de estado:** La ecuación de estado de un gas ideal, que relaciona la presión P , el volumen V y la temperatura T , se obtiene a partir de la descripción estadística del gas:
 - $PV = Nk_B T$
- **Teoría cinética de los gases:** Relaciona las propiedades microscópicas (como las velocidades de las partículas) con las propiedades macroscópicas (presión y temperatura).

9. Ejemplos prácticos y problemas

A medida que se enseñan estos conceptos, es útil resolver varios problemas prácticos:

- Determinar la energía interna de un gas ideal monoatómico.
- Calcular la temperatura de un gas a partir de la distribución de Maxwell-Boltzmann.
- Aplicar la ecuación de estado a un gas ideal y resolver problemas de presión, volumen y temperatura.

10. Visualización y simulaciones

Utilizar simulaciones y visualizaciones puede ser una herramienta excelente para ayudar a los estudiantes a comprender la teoría. Hay programas de simulación que permiten visualizar el movimiento de partículas en un gas ideal, lo cual hace que los conceptos abstractos sean más tangibles.

Conclusión

Enseñar la termodinámica estadística del gas ideal es una excelente manera de mostrar cómo las leyes macroscópicas de la física pueden derivarse de la probabilidad y el comportamiento microscópico de las partículas. A medida que introduces cada concepto, asegúrate de relacionarlo con ejemplos prácticos y visualizaciones, y de resaltar cómo la teoría estadística explica fenómenos observados en la vida real.

Pregunta 2. Usar Mathematica para obtener funciones de partición de gases ideales

Las **funciones de partición** en física estadística son herramientas clave para calcular las propiedades termodinámicas de un sistema a partir de su estado cuántico. En el caso de los **gases ideales**, la función de partición es fundamental para obtener varias magnitudes termodinámicas, como la energía interna, la entropía, la presión y la capacidad calorífica.

Vamos a ver cómo usar **Mathematica** para calcular la función de partición de un gas ideal. Para simplificar, consideraremos un gas ideal clásico, es decir, un gas compuesto por partículas no interactuantes que obedecen las leyes de la mecánica clásica (no cuántica) y están en equilibrio térmico.

1. Función de partición clásica

La función de partición Z de un sistema en estadística clásica se define como la suma sobre todos los estados posibles del sistema de las contribuciones de cada estado, con un peso $e^{-\beta E_i}$, donde E_i es la energía del estado i y $\beta=1/k_B T$ (con k_B siendo la constante de Boltzmann y T la temperatura).

En el caso de un **gas ideal clásico**, la función de partición $Z_{\text{clásica}}$ puede expresarse como:

$$Z_{\text{clásica}} = \frac{V}{\lambda^3}$$

donde V es el volumen del sistema y λ es la longitud de onda térmica, que se define como:

$$\lambda = \sqrt{\frac{h^2}{2\pi m k_B T}}$$

- h es la constante de Planck,
- m es la masa de la partícula del gas,
- T es la temperatura.

2. Función de partición en Mathematica

Vamos a usar Mathematica para calcular la función de partición del gas ideal. Consideraremos una cantidad N de partículas en el sistema.

2.1. Definimos las variables

Primero, definimos las variables que intervienen en la ecuación:

(* Definir las constantes *)

$h = 6.62607015 * 10^{-34}$; (* Constante de Planck en J·s *)

$k_B = 1.380649 * 10^{-23}$; (* Constante de Boltzmann en J/K *)

$m = 4.65 * 10^{-26}$; (* Masa de una partícula de gas (por ejemplo, helio) en kg *)

$T = 300$; (* Temperatura en K *)

$V = 1 \cdot 10^{-3}$; (* Volumen del sistema en m^3 *)

2.2. Calcular la longitud de onda térmica

Ahora calculamos la **longitud de onda térmica** λ , que depende de la temperatura y la masa de la partícula:

(* Longitud de onda térmica *)

$$\lambda = \text{Sqrt}[(h^2)/(2 \cdot \text{Pi} \cdot m \cdot k_B \cdot T)];$$

2.3. Función de partición de un gas ideal

La función de partición $Z_{\text{clásica}}$ es simplemente el volumen dividido por el cubo de la longitud de onda térmica:

(* Función de partición *)

$$Z_{\text{Clasica}} = V / \lambda^3;$$

2.4. Resultado

Para obtener el valor numérico de la función de partición, podemos evaluarlo con los valores específicos de las variables definidas:

(* Evaluar el valor numérico de la función de partición *)

$$Z_{\text{ClasicaNum}} = N[Z_{\text{Clasica}}]$$

3. Propiedades termodinámicas a partir de la función de partición

A partir de la función de partición, podemos calcular varias propiedades termodinámicas. Por ejemplo:

3.1. Energía interna

La energía interna U de un gas ideal se obtiene de la derivada logarítmica de la función de partición con respecto a $\beta = 1/k_B T$:

$$U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z$$

En Mathematica:

(* Función de partición logarítmica *)

$$\log Z = \text{Log}[Z_{\text{Clasica}}];$$

(* Derivada con respecto a beta para obtener la energía interna *)

$$U = -D[\log Z, 1/T] /. T \rightarrow 300$$

3.2. Entropía

La entropía S se calcula como:

$$S = k_B (\ln Z + \beta U)$$

En Mathematica:

(* Entropía S *)

$$S = k_B * (\log Z + (1/k_B/T) * U)$$

3.3. Presión

Para el gas ideal, la presión PPP se puede obtener mediante la relación:

$$P = k_B T \frac{\partial}{\partial V} \ln Z$$

En Mathematica:

(* Derivada con respecto al volumen para obtener la presión *)

$$P = k_B * T * D[\log Z, V] /. V \rightarrow 1 * 10^{-3}$$

4. Ejemplo completo en Mathematica

Aquí está el código completo para calcular la función de partición y algunas propiedades termodinámicas para un gas ideal:

(* Definir las constantes *)

$$h = 6.62607015 * 10^{-34}; (* Constante de Planck en J·s *)$$

$$k_B = 1.380649 * 10^{-23}; (* Constante de Boltzmann en J/K *)$$

$$m = 4.65 * 10^{-26}; (* Masa de una partícula de gas (ejemplo: helio) en kg *)$$

$$T = 300; (* Temperatura en K *)$$

$V = 1 * 10^{-3}$; (* Volumen en m^3 *)

(* Longitud de onda térmica *)

$\lambda = \text{Sqrt}[(h^2)/(2 * \text{Pi} * m * k_B * T)];$

(* Función de partición *)

$Z_{\text{Clasica}} = V / \lambda^3;$

(* Evaluar la función de partición numéricamente *)

$Z_{\text{ClasicaNum}} = N[Z_{\text{Clasica}}]$

(* Calcular la energía interna *)

$\log Z = \text{Log}[Z_{\text{Clasica}}];$

$U = -D[\log Z, 1/T] /. T \rightarrow 300;$

(* Calcular la entropía *)

$S = k_B * (\log Z + (1/k_B/T) * U);$

(* Calcular la presión *)

$P = k_B * T * D[\log Z, V] /. V \rightarrow 1 * 10^{-3};$

(* Resultados *)

{ $Z_{\text{ClasicaNum}}$, U , S , P }

Este código te proporcionará el valor de la función de partición, la energía interna, la entropía y la presión para el gas ideal a una temperatura de 300 K y un volumen de 1 cm^3 , considerando un gas con una masa de partícula como la del helio.

5. Notas finales

Este enfoque es para un **gas ideal clásico**. Si quieres considerar un gas ideal cuántico, la función de partición se modificaría porque se deben tener en cuenta los efectos cuánticos, y la suma sobre los estados posibles sería diferente. Para gases cuánticos, las distribuciones de ocupación de los niveles de energía (por ejemplo, distribución de Bose-Einstein para bosones o de Fermi-Dirac para fermiones) deben ser utilizadas.

En resumen, usando Mathematica, puedes calcular fácilmente la función de partición y diversas propiedades termodinámicas de un gas ideal clásico con las herramientas matemáticas disponibles en el software.

2. Gas Ideal Diatómico

Un **gas ideal diatómico** tiene contribuciones adicionales a la función de partición debido a los grados de libertad rotacionales y vibracionales. La función de partición total Z es el producto de las contribuciones traslacional, rotacional y vibracional.

2.1 Contribución Traslacional:

Es la misma que para el gas monoatómico:

$$Z_{\text{traslacional}} = \left(\frac{V}{\lambda^3} \right)^N$$

2.2 Contribución Rotacional:

Para una molécula diatómica, con dos grados de libertad rotacionales (aproximación clásica):

$$Z_{\text{rotacional}} = \frac{T}{\sigma h^2} \left(\frac{8\pi I}{k_B} \right)^{3/2}$$

Usar **Mathematica** para obtener funciones de partición de gases ideales es una excelente manera de explorar y entender cómo se relacionan las propiedades microscópicas de las partículas con las macroscópicas del sistema. A continuación, te mostraré cómo calcular la **función de partición** de un gas ideal en el contexto de diferentes tipos de gases ideales (monoatómicos, diatómicos) utilizando **Mathematica**.

- **2.3 Contribución Vibracional:**

- El modelo de oscilador armónico cuántico para la vibración de las moléculas da:

$$Z_{\text{vibracional}} = \frac{1}{1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}}}$$

donde $\hbar\omega$ es la energía de excitación vibracional, con ω siendo la frecuencia de vibración.

2.4 Función de Partición Total:

La función de partición total será el producto de todas estas contribuciones:

$$Z_{\text{total}} = Z_{\text{traslacional}} \cdot Z_{\text{rotacional}} \cdot Z_{\text{vibracional}}$$

Implementación en Mathematica para un gas ideal diatómico:

```
(* Definir las constantes físicas *)
h = 6.62607015*10^-34; (* Constante de Planck en J·s *)
kB = 1.380649*10^-23; (* Constante de Boltzmann en J/K *)
m = 4.65*10^-26; (* Masa de una partícula de gas ideal, por ejemplo, He en kg *)
T = 300; (* Temperatura en K *)
V = 1; (* Volumen en m^3 *)
N = 1; (* Número de partículas *)
sigma = 2; (* Grados de libertad rotacionales para molécula diatómica lineal *)
r = 1*10^-10; (* Distancia entre los átomos en m (ej. 1 Å) *)
omega = 1*10^13; (* Frecuencia de vibración en Hz *)
mu = m / 2; (* Masa reducida de la molécula diatómica (suponiendo igual masa) *)
(* Longitud de onda térmica de De Broglie *)
lambda = Sqrt[h^2 / (2 * Pi * m * kB * T)];
(* Contribución traslacional *)
Ztraslacional = (V / lambda^3)^N;
(* Momento de inercia *)
I = mu * r^2;
(* Contribución rotacional *)
Zrotacional = (T / (sigma * h^2)) * (8 * Pi * I / kB)^(3/2);
(* Contribución vibracional *)
Zvibracional = 1 / (1 - Exp[-(h * omega) / (kB * T)]);
(* Función de partición total *)
ZTotal = Ztraslacional * Zrotacional * Zvibracional
(* Resultado: ZTotal es la función de partición total para N partículas *)
```

Este código calcula la función de partición total para un gas ideal diatómico, considerando contribuciones traslacionales, rotacionales y vibracionales.

3. Propiedades Termodinámicas Derivadas de la Función de Partición

Una vez que tienes la función de partición Z , puedes calcular varias propiedades termodinámicas importantes, como la energía interna, la entropía, la presión, y la capacidad calorífica.

3.1 Energía Interna:

La energía interna promedio $\langle E \rangle$ se puede obtener mediante la relación:

$$\langle E \rangle = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z$$

donde $\beta = 1/k_B T$.

En **Mathematica**:

(* Cálculo de la energía interna *)

$$\beta = 1 / (k_B * T);$$

$$E = -D[\text{Log}[Z_{\text{Total}}], \beta]$$

(* Resultado: E es la energía interna promedio *)

3.2 Presión:

La presión P de un gas ideal se relaciona con la función de partición mediante la siguiente fórmula:

$$P = \frac{k_B T}{V} \cdot \ln Z$$

En **Mathematica**:

(* Cálculo de la presión *)

$$P = (k_B * T / V) * \text{Log}[Z_{\text{Total}}]$$

(* Resultado: P es la presión del gas *)

3.3 Capacidad Calorífica:

La capacidad calorífica a volumen constante C_V se puede obtener mediante:

$$C_V = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T}$$

(* Cálculo de la capacidad calorífica a volumen constante *)

$$C_V = D[E, T]$$

(* Resultado: C_V es la capacidad calorífica a volumen constante *)

Conclusión

Usar **Mathematica** para obtener funciones de partición de gases ideales te permite trabajar de manera simbólica y computacional con las ecuaciones termodinámicas. Esto facilita el cálculo de diversas propiedades macroscópicas del gas a partir de su descripción microscópica. Además,

Mathematica es útil para experimentar con diferentes tipos de gases y calcular propiedades como la energía interna, la presión y la capacidad calorífica de manera eficiente.

Pregunta 3. Aplicar programas de simulación molecular en la enseñanza de la termodinámica estadística

La **simulación molecular** es una herramienta poderosa y cada vez más accesible que permite a los estudiantes visualizar y entender los principios de la **termodinámica estadística** de una manera práctica. Estas simulaciones pueden proporcionar una forma interactiva de explorar el comportamiento de partículas a nivel microscópico y conectar esos comportamientos con las propiedades macroscópicas observadas en la termodinámica clásica. Al integrar programas de simulación molecular en la enseñanza de la termodinámica estadística, se facilita la comprensión de conceptos abstractos y se ofrece una experiencia de aprendizaje más inmersiva.

1. Conceptos Clave de la Termodinámica Estadística

Primero, es importante que los estudiantes comprendan algunos de los conceptos clave de la termodinámica estadística, tales como:

- **Microestados y macroestados:** Los microestados son las configuraciones posibles de un sistema a nivel microscópico, y los macroestados son las propiedades observables que resultan de la combinación de microestados.
- **Función de partición (Z):** La función de partición es fundamental en la estadística termodinámica porque conecta los microestados con las propiedades macroscópicas.
- **Ensamble y distribución de probabilidades:** Un ensamble es una colección hipotética de sistemas idénticos que representan todas las configuraciones posibles que un sistema puede adoptar bajo ciertas condiciones macroscópicas.
- **Relaciones termodinámicas:** Como la energía interna, la entropía, la temperatura, la presión, entre otras, que se pueden calcular a partir de la función de partición y los microestados.

2. Beneficios de la Simulación Molecular en la Enseñanza

2.1 Visualización de Microestados

La simulación molecular permite visualizar cómo se mueven las partículas en un sistema y cómo estas interacciones determinan las propiedades macroscópicas del sistema. Por ejemplo:

- **Movimiento de partículas:** Se puede observar cómo las partículas de un gas ideal se mueven aleatoriamente y cómo sus colisiones (aunque elásticas) afectan la presión y la temperatura del sistema.
- **Distribución de energías:** A través de simulaciones, los estudiantes pueden ver cómo se distribuyen las energías cinéticas y potenciales entre las partículas, lo que ayuda a entender la **distribución de Maxwell-Boltzmann** y la **ley de equipartición de la energía**.
- **2.2 Explorar Conceptos Abstractos**

Conceptos abstractos como la **entropía**, los **microestados** y los **ensambles estadísticos** pueden ser difíciles de entender solo a nivel teórico. Sin embargo, mediante simulaciones, los estudiantes pueden ver cómo un sistema tiende a un estado de mayor probabilidad (mayor entropía) y cómo las variables macroscópicas se relacionan con las interacciones microscópicas.

2.3 Experimentación con Variables de Sistema

Los estudiantes pueden modificar variables como la **temperatura**, el **volumen** y el **número de partículas**, y observar cómo estos cambios afectan el comportamiento del sistema en tiempo real. Esto ayuda a conectar las ecuaciones de la termodinámica estadística con experimentos virtuales.

2.4 Desarrollo de Habilidades Computacionales

Al usar simulaciones moleculares, los estudiantes también adquieren experiencia en programación y manejo de software científico. Esto les da una comprensión más profunda de cómo se pueden modelar sistemas físicos utilizando herramientas computacionales.

3. Programas de Simulación Molecular en la Enseñanza

Existen varias herramientas y programas de simulación molecular que se pueden usar para enseñar termodinámica estadística. Algunos de los más populares y accesibles son:

3.1 PhET Simulations (Universidad de Colorado)

Las simulaciones de PhET son altamente interactivas y están diseñadas específicamente para la educación. Tienen una serie de simulaciones que permiten a los estudiantes observar el comportamiento de las partículas en gases ideales, líquidos y sólidos, y cómo las variables macroscópicas afectan el sistema.

- **Simulación recomendada: Gas Properties** (Propiedades de los gases), donde los estudiantes pueden observar el movimiento de las moléculas de un gas ideal y cómo varían propiedades como la presión, volumen y temperatura.

Ventajas:

- Gratuito y fácil de usar.
- Visualización clara y dinámica del comportamiento molecular.
- Atractivo para estudiantes sin experiencia previa en programación.

3.2 GROMACS

GROMACS es uno de los paquetes de simulación molecular más poderosos y ampliamente utilizados. Se utiliza principalmente en la simulación de líquidos y sólidos, y puede ser usado para estudiar las interacciones entre moléculas. Aunque es más avanzado, GROMACS es muy

útil para enseñar simulaciones de sistemas más complejos que los gases ideales, como las simulaciones de **líquidos simples** o sistemas de moléculas complejas.

Ventajas:

- Potente para simulaciones de dinámica molecular.
- Permite explorar sistemas más complejos (no solo gases ideales).
- Gran comunidad de usuarios y documentación.

Desventajas:

- Requiere conocimientos previos de programación y de cómo realizar simulaciones.

3.3 LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator)

LAMMPS es otro software de simulación molecular ampliamente utilizado. Se emplea para modelar materiales a nivel atómico y molecular, permitiendo realizar simulaciones de dinámica molecular, entre otras. Es flexible y se puede aplicar a gases, líquidos y sólidos.

Ventajas:

- Versatilidad para diferentes tipos de simulaciones (gases, líquidos, sólidos, polímeros, etc.).
- Potente, permite trabajar con sistemas grandes.
- Excelente para simular sistemas en condiciones no ideales.

Desventajas:

- Curva de aprendizaje empinada.
- Requiere conocimientos técnicos de simulaciones y programación.

3.4 Monte Carlo Simulations

Las simulaciones de **Monte Carlo** pueden ser útiles para enseñar conceptos de estadística y probabilidades. En estas simulaciones, las configuraciones del sistema se generan al azar (método probabilístico), y se pueden usar para obtener estimaciones de propiedades termodinámicas como la energía, la presión y la entropía a partir de una función de partición.

Ventajas:

- Proporcionan una forma de obtener resultados aproximados sin tener que resolver las ecuaciones exactas.
- Muy útiles para sistemas en equilibrio termodinámico.

Desventajas:

- Menos intuitivas que otras simulaciones.
- Requiere cierta comprensión del método y de la teoría detrás de las simulaciones de Monte Carlo.

4. Cómo Incorporar Simulaciones Moleculares en la Enseñanza de Termodinámica Estadística

4.1 Introducción a la Simulación

Comienza explicando los conceptos básicos de la termodinámica estadística, como microestados, macroestados y la función de partición. Luego, muestra cómo estos conceptos se pueden visualizar utilizando simulaciones moleculares. Los estudiantes pueden observar cómo las partículas interactúan y cómo esas interacciones afectan las propiedades macroscópicas como presión, temperatura y volumen.

4.2 Actividades Guiadas

Organiza actividades donde los estudiantes usen simulaciones para experimentar con diferentes variables:

- **Volumen y presión:** Pide a los estudiantes que simulen un gas ideal en una caja y cambien el volumen. Luego, deben observar cómo cambia la presión.
- **Temperatura y energía interna:** Deja que los estudiantes ajusten la temperatura en una simulación de gas ideal y vean cómo varía la energía cinética promedio de las partículas.
- **Estudio de transiciones de fase:** Si se usan simulaciones más avanzadas (por ejemplo, con GROMACS o LAMMPS), los estudiantes pueden estudiar cómo las moléculas de un líquido pasan a un gas (evaporación) y cómo esto está relacionado con la entalpía de vaporización.

4.3 Experimentos Virtuales

Asigna proyectos de simulación donde los estudiantes puedan explorar la termodinámica estadística en diferentes sistemas. Por ejemplo, pueden investigar la **relación entre la temperatura y la entropía**, o cómo las funciones de partición afectan la energía interna y la presión de un sistema.

4.4 Discusión y Análisis de Resultados

Después de realizar simulaciones, organiza sesiones de discusión en las que los estudiantes puedan analizar los resultados obtenidos:

- ¿Cómo cambian las propiedades macroscópicas cuando varían las condiciones microscópicas?
- ¿Qué propiedades se pueden predecir usando la función de partición?
- ¿Cómo se relacionan los resultados simulados con las predicciones teóricas?

Conclusión

La incorporación de **simulaciones moleculares** en la enseñanza de la **termodinámica estadística** proporciona a los estudiantes una forma interactiva y visual de explorar los principios fundamentales de la física. Además, les permite realizar experimentos que de otro modo podrían ser demasiado costosos o difíciles de realizar en un laboratorio físico. Programas como **PhET**, **GROMACS**, **LAMMPS** y las simulaciones de **Monte Carlo** son herramientas poderosas que pueden transformar el aprendizaje de la termodinámica en una experiencia más accesible, intuitiva y profundamente interactiva.

Pregunta 4. ¿Cómo evaluar al alumno sobre termodinámica estadística elemental?

Evaluar a los alumnos sobre **termodinámica estadística elemental** puede ser un desafío, ya que involucra tanto conceptos abstractos como habilidades matemáticas y de interpretación física. La evaluación debe abordar diferentes niveles de comprensión, desde el conocimiento básico hasta la capacidad de aplicar los conceptos en situaciones problemáticas.

Aquí te ofrezco algunas ideas para **evaluar** a los estudiantes de manera efectiva en este tema:

1. Evaluación Teórica (Conocimientos fundamentales)

Esta parte se enfoca en que los estudiantes comprendan y recuerden los principios fundamentales de la termodinámica estadística. Los exámenes de opción múltiple, preguntas de respuesta corta y ejercicios teóricos son útiles aquí.

Posibles preguntas para evaluación teórica:

- **Definiciones clave:**
 - ¿Qué es la función de partición? ¿Cómo se relaciona con las propiedades termodinámicas de un sistema?
 - Define $\beta=1/k_B T$ y explica su relevancia.
 - ¿Qué diferencia hay entre un sistema cuántico y un sistema clásico desde el punto de vista de la termodinámica estadística?
- **Conceptos fundamentales:**
 - Explicar el concepto de **microestado** y **macroestado**.
 - ¿Qué es el principio de equipartición de la energía y cómo se aplica a un gas ideal?
 - Relacionar las cantidades termodinámicas (energía interna, entropía, presión) con la función de partición.
- **Fórmulas importantes:**
 - Deriva la expresión para la energía interna

$$U = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z.$$

- ¿Cómo se obtiene la entropía de un gas ideal utilizando la función de partición?

Evaluación de conceptos abstractos:

- Explicar cómo se relacionan la **entropía** y la **probabilidad** en el contexto de la termodinámica estadística.
- ¿Qué implica el concepto de **distribución de Boltzmann** y cómo afecta la ocupación de niveles de energía?

2. Evaluación Práctica (Aplicación de fórmulas y resolución de problemas)

Esta parte evalúa la capacidad de los estudiantes para aplicar los conceptos teóricos a situaciones prácticas. Los problemas pueden ser tanto de cálculo como de interpretación física, y pueden involucrar el uso de software (como Mathematica o Python) o cálculos a mano.

Posibles ejercicios de evaluación práctica:

1. Cálculos de la función de partición:

- Un problema en el que se le da un gas ideal clásico, con parámetros como el volumen, la temperatura y la masa de las partículas, y se le pide al alumno que calcule la función de partición $Z_{\text{clásica}}$ y la energía interna U a partir de la fórmula de la función de partición.
- Ejemplo:
 - Un gas ideal está contenido en un volumen de 1 L a 300 K. La masa de la partícula es $m=4 \times 10^{-26}$ kgm. Calcular la longitud de onda térmica λ , la función de partición $Z_{\text{clásica}}$, la energía interna y la presión.

2. Cálculos de la energía interna y la entropía:

- Usando la función de partición, pedir que calculen la energía interna y la entropía del sistema.
- Ejemplo:
 - Si $Z_{\text{clásica}}=1.5 \times 10^{24}$ ¿cuál es la energía interna a una temperatura de 300 K? ¿Cómo cambiaría la entropía?

3. Distribuciones estadísticas:

- Proponer problemas en los que los estudiantes deban trabajar con distribuciones de probabilidad (por ejemplo, la distribución de Boltzmann) y calcular probabilidades de ocupación de niveles de energía para gases ideales, bosones o fermiones.
- Ejemplo:
 - Dado un sistema cuántico, calcular la ocupación de un estado con energía E_1 en función de la temperatura, usando la distribución de Boltzmann.

Aplicación a sistemas físicos:

- Los estudiantes podrían ser evaluados sobre cómo aplicar la termodinámica estadística a sistemas físicos reales (por ejemplo, un gas ideal, un gas de bosones o fermiones, un sistema de partículas interactivas).
- Ejemplo:

- Calcular las propiedades termodinámicas de un gas de fermiones a una temperatura baja utilizando el principio de exclusión de Pauli.

3. Evaluación Interpretativa y de Razonamiento Físico

A menudo, los problemas de termodinámica estadística no solo requieren cálculos, sino también que los estudiantes interpreten los resultados y los conecten con la física subyacente. Esto pone a prueba su comprensión conceptual y su capacidad para pensar críticamente.

Ejemplos de preguntas interpretativas:

- **Sobre los resultados:**
 - Si se obtiene una función de partición muy grande, ¿qué implicaciones tiene esto sobre el sistema? ¿Qué pasa a medida que la temperatura se acerca al cero absoluto?
 - Si la energía interna de un gas aumenta con la temperatura, ¿cómo se interpreta este comportamiento a partir de la función de partición?
- **Sobre los modelos y aproximaciones:**
 - Explique cómo la termodinámica estadística explica la relación entre presión, volumen y temperatura en un gas ideal. ¿Por qué el modelo de gas ideal es una aproximación válida para muchos gases a altas temperaturas y bajas presiones?
 - ¿Cómo cambiarían las ecuaciones de estado para un gas no ideal en comparación con un gas ideal?
- **Implicaciones físicas:**
 - Si un gas de partículas no interactuantes sigue una distribución de Maxwell-Boltzmann, ¿qué significa esto en términos de la velocidad de las partículas? ¿Qué implicaciones tiene este comportamiento para las propiedades termodinámicas?

4. Evaluación Continua (Proyectos y Tareas)

Además de los exámenes formales, los proyectos y las tareas pueden ser útiles para evaluar la capacidad de los estudiantes para investigar y aplicar los conceptos por su cuenta.

Posibles tareas para evaluación continua:

- **Proyecto sobre gases ideales y no ideales:**
 - Los estudiantes pueden realizar un proyecto en el que estudien las propiedades termodinámicas de un gas ideal y un gas no ideal (por ejemplo, usando el modelo de Van der Waals). Deben realizar cálculos, interpretar los resultados y presentar sus conclusiones.
- **Simulaciones numéricas:**
 - Los estudiantes pueden realizar simulaciones utilizando herramientas como **Mathematica**, **Python**, o incluso hojas de cálculo para estudiar el comportamiento de gases ideales o sistemas más complejos a temperaturas y

presiones variables. La tarea puede incluir la comparación entre los resultados obtenidos numéricamente y los resultados teóricos.

- **Análisis de datos experimentales:**
 - Proponerles un conjunto de datos experimentales sobre un gas real (por ejemplo, la relación presión-volumen-temperatura) y pedirles que utilicen la termodinámica estadística para interpretar los resultados y hacer ajustes con un modelo adecuado (como el modelo de gas ideal o de Van der Waals).

5. Evaluación con Software

Si los estudiantes tienen acceso a software de cálculo simbólico como **Mathematica**, **Python (SciPy, NumPy)** o incluso simuladores, podrían ser evaluados en función de cómo usan estas herramientas para realizar cálculos complejos y obtener resultados precisos.

Ejemplo de evaluación con software:

- Proporcionar un conjunto de problemas para los cuales deben usar **Mathematica** para calcular la función de partición y obtener propiedades como la energía interna, la entropía y la presión de un gas ideal en equilibrio térmico.

Resumen de las estrategias de evaluación

1. **Exámenes teóricos:** Preguntas de definición y conceptos clave.
2. **Problemas prácticos:** Cálculos de la función de partición y derivadas termodinámicas.
3. **Evaluación interpretativa:** Preguntas que requieren razonamiento físico y interpretación de resultados.
4. **Tareas y proyectos:** Aplicación de conceptos en situaciones reales o simuladas.
5. **Evaluación continua con software:** Uso de herramientas de cálculo simbólico para abordar problemas complejos.

Este enfoque permitirá evaluar no solo el conocimiento de los conceptos básicos, sino también la capacidad de los estudiantes para aplicar la teoría de manera práctica y comprender las implicaciones físicas de los resultados obtenidos.

Pregunta 5. Bibliografía para entender termodinámica estadística elemental

La **termodinámica estadística** es una disciplina fundamental para comprender las propiedades macroscópicas de los sistemas a partir de su comportamiento microscópico, utilizando principios de la mecánica estadística y la teoría de probabilidades. A continuación te proporciono una lista de **bibliografía recomendada** para aprender y profundizar en la termodinámica estadística, desde un nivel elemental hasta uno más avanzado.

1. Libros Introductorios y Elementales

1.1. "Termodinámica y Física Estadística" de Enrico Fermi

- **Descripción:** Este libro es un clásico que aborda la termodinámica y la física estadística de manera clara y accesible. Fermi, uno de los físicos más importantes del siglo XX, presenta los conceptos de forma intuitiva, con una base sólida de cálculos y ejemplos.
- **Por qué es útil:** Es ideal para estudiantes que están comenzando a aprender termodinámica estadística, ya que presenta los conceptos fundamentales de manera directa y concisa.

1.2. "Introducción a la Termodinámica Estadística" de Richard C. Tolman

- **Descripción:** Tolman ofrece un enfoque claro sobre la termodinámica y la física estadística, cubriendo temas como la entropía, la energía interna, y las funciones de partición.
- **Por qué es útil:** Proporciona una excelente introducción para estudiantes con conocimientos básicos de termodinámica, sin ser demasiado técnico.

1.3. "Física Estadística" de R.K. Pathria y Paul D. Beale

- **Descripción:** Es un texto ampliamente utilizado en cursos universitarios. Ofrece una descripción detallada de los principios de la física estadística y de cómo estos se aplican a sistemas físicos, desde el gas ideal hasta sistemas más complejos.
- **Por qué es útil:** Aunque es un poco más avanzado, Pathria ofrece una estructura clara y ejemplos matemáticos que permiten a los estudiantes obtener una comprensión profunda.

2. Libros Intermedios y de Profundización

2.1. "Fundamentos de Termodinámica Estadística" de Gordon J. Van Wylen y Richard E. Sonntag

- **Descripción:** Este libro es excelente para estudiantes de física e ingeniería. Combina la teoría de la termodinámica con la estadística, tratando de manera clara y profunda las aplicaciones prácticas y conceptos teóricos.
- **Por qué es útil:** Tiene una gran cantidad de ejemplos prácticos y problemas resueltos, lo que lo hace muy útil para los estudiantes que buscan una comprensión más completa.

2.2. "Física Estadística: Una Introducción" de Mark E. J. Newman

- **Descripción:** Es un excelente texto introductorio que cubre la física estadística desde una perspectiva moderna. El libro cubre los conceptos fundamentales de manera accesible, sin perder rigurosidad matemática.
- **Por qué es útil:** Su enfoque pedagógico y la claridad en la presentación hacen que sea una excelente opción para los que buscan entender los fundamentos básicos de la física estadística.

2.3. "Statistical Physics of Particles" de Mehran Kardar

- **Descripción:** Este texto de Kardar cubre tanto los aspectos básicos como los más avanzados de la física estadística, abarcando una amplia gama de sistemas desde gases ideales hasta sistemas fuera del equilibrio.
- **Por qué es útil:** Es una excelente opción para aquellos que desean una introducción un poco más moderna y completa, sin volverse demasiado técnico en las primeras etapas.

3. Libros Avanzados

3.1. "Statistical Mechanics: Algorithms and Computations" de W. Janke y R. K. P. Zia

- **Descripción:** Este libro es ideal para estudiantes avanzados y para aquellos interesados en usar métodos numéricos para estudiar sistemas estadísticos. Se centra en la mecánica estadística computacional y los métodos numéricos modernos.
- **Por qué es útil:** Ideal para aquellos que desean aprender a resolver problemas de física estadística mediante simulaciones computacionales y algoritmos.

3.2. "Statistical Mechanics: A Set of Lectures" de Richard P. Feynman

- **Descripción:** Feynman presenta en este libro una serie de lecciones sobre mecánica estadística. Aunque es más bien una recopilación de sus conferencias, es uno de los enfoques más accesibles y pedagógicos para estudiantes avanzados.
- **Por qué es útil:** La forma en que Feynman comunica conceptos complejos de manera intuitiva y profunda hace de este libro un clásico.

3.3. "Statistical Mechanics" de R.K. Gupta

- **Descripción:** Este libro es muy detallado y cubre tanto la mecánica estadística clásica como cuántica. Abarca una amplia gama de temas, desde los fundamentos de la teoría hasta aplicaciones en física moderna.
- **Por qué es útil:** Proporciona una cobertura profunda de los temas fundamentales y avanzados de la física estadística, con una gran cantidad de ejemplos.

4. Libros de Apoyo y Problemas Resueltos

4.1. "Problems and Solutions in Thermodynamics and Statistical Physics" de A. G. Every

- **Descripción:** Un libro con una colección de problemas resueltos que cubren una amplia gama de temas en termodinámica y física estadística. Es una excelente manera de reforzar conceptos y adquirir experiencia práctica.
- **Por qué es útil:** Ideal para estudiantes que prefieren aprender resolviendo ejercicios prácticos. Cada solución viene acompañada de una explicación detallada.

4.2. "Problems in Thermodynamics and Statistical Physics" de F. Reif

- **Descripción:** Este es un libro de problemas clásicos en física estadística que cubre desde temas básicos hasta avanzados. Los problemas son muy representativos de los desafíos que enfrentan los estudiantes en los exámenes.
- **Por qué es útil:** Es excelente para complementar la teoría con ejercicios prácticos que permiten consolidar la comprensión de la materia.

5. Recursos en Línea

5.1. MIT OpenCourseWare (OCW):

- **Descripción:** El MIT ofrece cursos de física estadística de acceso gratuito. En particular, el curso 8.044 (Thermodynamics and Statistical Mechanics) es una excelente referencia para aquellos que prefieren una estructura de aprendizaje más guiada.
- **Enlace:** MIT OpenCourseWare: Thermodynamics & Statistical Mechanics

5.2. Khan Academy:

- **Descripción:** Aunque la Khan Academy no cubre toda la termodinámica estadística, tiene muchos recursos en física que son útiles como complemento, especialmente sobre la termodinámica clásica y las leyes fundamentales.
- **Enlace:** [Khan Academy - Física](#)

5.3. YouTube - Lecturas y Clases sobre Termodinámica Estadística:

- Existen varios canales en YouTube que presentan cursos de termodinámica y física estadística, con una mezcla de lecciones teóricas y ejemplos prácticos. Algunos canales como **MinutePhysics** o **Physics Explained** son útiles para explicaciones rápidas.

Conclusión

Para un **aprendizaje gradual** de la **termodinámica estadística elemental**, es recomendable comenzar con libros como los de **Enrico Fermi** o **Tolman**, que proporcionan una base sólida y fácil de entender. A medida que los estudiantes avancen, pueden sumergirse en textos más detallados y técnicos como los de **Pathria**, **Kardar** o **Reif**. Además, el uso de recursos interactivos y problemas resueltos será de gran ayuda para reforzar los conceptos teóricos.

#####

UEA Laboratorio de Físicoquímica Computacional. Parte de Simulación Molecular.

En esta parte del curso se usan programas de dinámica molecular, como GROMACS, para estudiar sistemas con interacción molecular en la fase líquida, equilibrio líquido-vapor de uno y dos componentes.

La información está basada en las siguientes 5 preguntas:

Pregunta 1. ¿Como enseñar las interacciones moleculares de fluidos?

Pregunta 2. ¿Como enseñar dinámica molecular?

Pregunta 3. ¿Como enseñar el equilibrio líquido-vapor con dinámica molecular?

Pregunta 4. La tensión superficial con dinámica molecular

Pregunta 5. ¿Como enseñar el plegamiento en proteínas con dinámica molecular?

Pregunta 1. ¿Como enseñar las interacciones moleculares de fluidos?

Enseñar las **interacciones moleculares de fluidos** es un tema fundamental en la **termodinámica**, la **física estadística** y la **química física**. Las interacciones moleculares determinan muchas de las propiedades macroscópicas de los fluidos, como la viscosidad, la presión, la densidad y el comportamiento de los gases y líquidos.

El proceso de enseñanza debe seguir un enfoque estructurado que abarque tanto los principios teóricos como la aplicación práctica a través de ejemplos y ejercicios. Aquí te ofrezco una guía sobre cómo enseñar este tema de manera efectiva:

1. Introducción a los Conceptos Básicos

Objetivos Iniciales:

- Introducir las **interacciones moleculares** y su importancia en los fluidos.
- Relacionar las interacciones moleculares con propiedades macroscópicas observables (como presión y temperatura).
- Presentar las **fuerzas fundamentales** que actúan entre las moléculas.

Paso 1: Explicar las Interacciones Moleculares

Las moléculas en los fluidos están sometidas a varias interacciones:

- **Fuerzas de Van der Waals:** interacciones a corta distancia (fuerzas atractivas y repulsivas).
- **Fuerzas electrostáticas:** interacciones entre moléculas polares o entre cargas.
- **Puentes de hidrógeno:** interacciones específicas entre átomos de hidrógeno y átomos electronegativos (como oxígeno o nitrógeno).
- **Interacciones de dispersión:** fuerzas de atracción debidas a la polarización inducida de las moléculas (común en moléculas no polares).

Paso 2: Relación con el Comportamiento Macroscópico

Estas interacciones son las responsables de muchas propiedades físicas de los fluidos:

- La **viscosidad** de un fluido depende de cómo las moléculas interactúan entre sí y se resisten al deslizamiento unas con otras.

- La **tensión superficial** es un resultado directo de las interacciones entre las moléculas en la superficie del líquido y las del interior del líquido.
- El **punto de ebullición y fusión** también depende de la naturaleza y la intensidad de las interacciones moleculares.

Puedes usar **modelos de referencia** simples para explicar cómo las interacciones moleculares determinan las propiedades de los fluidos:

- **Modelo de gas ideal:** para líquidos y gases, las interacciones entre las moléculas se desprecian en el gas ideal.
 - **Modelo de gas real (Van der Waals):** para líquidos y gases reales, se incluyen interacciones atractivas y repulsivas.
-

2. Modelos y Teorías de Interacciones Moleculares

Objetivos:

- Explicar los **modelos** que se utilizan para describir las interacciones moleculares en los fluidos.
- Relacionar estos modelos con las propiedades macroscópicas observables.

Paso 1: Modelo de Van der Waals

Presenta el modelo de **Van der Waals** para gases reales. Este modelo ajusta la ecuación de estado del gas ideal para incluir interacciones moleculares:

$$\left(P + \frac{a}{V^2}\right)(V - b) = RT$$

- **a:** parámetro que describe la intensidad de las fuerzas atractivas entre moléculas.
- **b:** volumen excluido, que tiene en cuenta el volumen finito de las moléculas.

Paso 2: Modelos de Interacciones en Líquidos (Teoría de Líquidos)

A continuación, introduce modelos de interacciones moleculares en líquidos:

- **Teoría de líquidos de intermolecular:** como el modelo de **teoría de redes de moléculas** o **modelo de esferas duras**, que se pueden utilizar para explicar la estructura y las propiedades de los líquidos a nivel molecular.
- **Modelo de potencial de Lennard-Jones:** describe interacciones entre moléculas que tienen un comportamiento de repulsión a corta distancia y de atracción a largas distancias.

Paso 3: Introducción a las Fuerzas de Interacción

Explique con más detalle las distintas fuerzas que afectan a las moléculas en un fluido:

- **Fuerzas Repulsivas:** Debido a la repulsión de las nubes electrónicas de las moléculas cercanas.
- **Fuerzas Atractivas:** Como las fuerzas de dispersión de London, interacciones dipolo-dipolo y puentes de hidrógeno.

Puedes ilustrar las diferentes interacciones con diagramas de **potencial de Lennard-Jones** que muestran cómo la energía potencial varía con la distancia entre moléculas.

3. Propiedades Macroscópicas Derivadas de las Interacciones Moleculares

Objetivos:

- Relacionar las interacciones moleculares con propiedades macroscópicas como la presión, la densidad y la temperatura.

Paso 1: Ecuación de Estado y Relaciones Macroscópicas

Los estudiantes deben entender cómo las interacciones moleculares se reflejan en la **ecuación de estado** de un fluido:

- Para **gases ideales**, la ecuación de estado es

$$P = \frac{nRT}{V}$$

- Para **gases reales**, se debe considerar el **volumen excluido** y las **fuerzas de atracción**, como en la ecuación de Van der Waals.

A medida que los fluidos pasan de gaseosos a líquidos, las interacciones moleculares se vuelven cada vez más importantes. La transición de fase se puede estudiar utilizando diagramas de **presión-temperatura** y explicando la **cohesión molecular** en líquidos.

Paso 2: Propiedades como Viscosidad y Tensión Superficial

Enseña cómo las interacciones moleculares afectan propiedades específicas:

- **Viscosidad:** La viscosidad de un fluido depende de cómo las moléculas se mueven y se deslizan unas sobre otras, lo cual está relacionado con la naturaleza de las interacciones moleculares.
- **Tensión superficial:** Relacionada con la energía de las moléculas en la superficie de un líquido debido a las interacciones con las moléculas del interior. Puedes hacer

experimentos con **gotas de agua** para ilustrar cómo las fuerzas intermoleculares causan la formación de gotas esféricas.

4. Métodos de Enseñanza Activa

1. Experimentos Prácticos

Los experimentos son muy útiles para ayudar a los estudiantes a visualizar los conceptos:

- **Demostración de la tensión superficial:** Coloca una aguja sobre la superficie de agua y muestra cómo la tensión superficial mantiene la aguja flotando, a pesar de que es más densa que el agua.
- **Viscosidad de líquidos:** Realiza experimentos sencillos con líquidos de diferentes viscosidades (aceite, agua, alcohol) para mostrar cómo las interacciones moleculares afectan la fluidez de los líquidos.

2. Simulaciones y Modelos Computacionales

Utilizar **simulaciones de dinámica molecular** o herramientas como **Mathematica**, **Python (con módulos como MDTraj o LAMMPS)**, o simuladores interactivos para que los estudiantes puedan explorar el comportamiento molecular y observar cómo cambian las interacciones con la temperatura y la presión.

3. Ejercicios y Problemas

Plantea problemas donde los estudiantes deben:

- Calcular el volumen de exclusión para diferentes gases utilizando la ecuación de Van der Waals.
- Comparar el comportamiento de un gas ideal con un gas real usando diferentes parámetros de interacción.
- Interpretar cómo los cambios en la temperatura afectan a la viscosidad o la densidad de un fluido.

4. Uso de Diagramas de Fases

Los diagramas de fases son una excelente herramienta visual para enseñar cómo las interacciones moleculares afectan las transiciones de fase, como la **fusión**, **evaporación** y **condensación**. Explicar los diagramas de fases de gases, líquidos y sólidos ayudará a los estudiantes a comprender cómo las moléculas interactúan a distintas temperaturas y presiones.

5. Recursos Visuales y Multimedia

1. Videos y Simulaciones Interactivas

- Utiliza videos que muestren simulaciones de las interacciones moleculares en fluidos. Por ejemplo, simulaciones de **dinámica molecular** que muestran cómo las moléculas se agrupan, se repelen o se atraen entre sí.
- **PhET Simulations** de la Universidad de Colorado tienen simulaciones interactivas sobre fluidos, gases y otras propiedades moleculares que pueden ser útiles.

2. Software de Visualización

Herramientas como **VMD (Visual Molecular Dynamics)** o **PyMOL** pueden ser utilizadas para visualizar interacciones moleculares y simular comportamientos en sistemas complejos.

6. Evaluación y Seguimiento

Finalmente, para evaluar el aprendizaje de los estudiantes:

- **Cuestionarios:** Incluye preguntas sobre los tipos de interacciones moleculares, su influencia en las propiedades macroscópicas y cómo se modelan en distintos estados de la materia.
- **Problemas de aplicación:** Plantea problemas que involucren el cálculo de propiedades como la viscosidad o la densidad usando los modelos discutidos.
- **Proyectos prácticos:** Pide a los estudiantes que lleven a cabo experimentos simples y analicen cómo las interacciones moleculares influyen en los resultados observados.

Pregunta 2. ¿Cómo enseñar dinámica molecular?

Enseñar **dinámica molecular** (MD, por sus siglas en inglés) es una tarea apasionante y desafiante, que involucra tanto conceptos fundamentales de la física como herramientas computacionales avanzadas. La dinámica molecular se utiliza para estudiar el comportamiento de las partículas (átomos o moléculas) en sistemas macroscópicos mediante simulaciones, donde se resuelven las ecuaciones de movimiento de las partículas a nivel atómico.

La clave para enseñar dinámica molecular de manera efectiva es integrar teoría, aplicaciones prácticas y habilidades computacionales, mientras se hace que los estudiantes comprendan los principios fundamentales que subyacen a este campo. A continuación te doy una guía detallada sobre cómo enseñar dinámica molecular de manera estructurada.

1. Introducción a la Dinámica Molecular

Objetivos Iniciales:

- Introducir el concepto de dinámica molecular y explicar su propósito y aplicaciones.
- Presentar las bases teóricas que sustentan las simulaciones de dinámica molecular.

Paso 1: Qué es la Dinámica Molecular

La dinámica molecular es una técnica computacional que simula el movimiento de átomos y moléculas bajo la influencia de fuerzas, basándose en las **ecuaciones de Newton** de movimiento. Se usa para estudiar materiales, líquidos, gases, biomoléculas, etc., a nivel atómico o molecular.

Paso 2: Aplicaciones de la Dinámica Molecular

- **Estudio de materiales:** Simular cómo interactúan los átomos en materiales sólidos, líquidos o gases.
- **Simulación de moléculas biológicas:** Análisis de proteínas, ADN, interacciones moleculares en biomoléculas.
- **Fenómenos macroscópicos:** Calcular propiedades macroscópicas (viscosidad, difusividad, etc.) a partir de simulaciones microscópicas.

Paso 3: Principios Básicos de Dinámica Molecular

Explica cómo se calculan las trayectorias de las partículas:

- **Ecuaciones de movimiento de Newton:** Las partículas se mueven según la ley de Newton $F=ma$ y la simulación consiste en calcular la fuerza F que actúa sobre las partículas y luego integrar estas ecuaciones para obtener sus trayectorias en el tiempo.

2. Fundamentos Teóricos

Objetivos:

- Explicar la teoría detrás de la dinámica molecular, especialmente la fuerza que actúa entre las partículas.
- Introducir la ecuación de movimiento y los integradores numéricos.

Paso 1: Potenciales de Interacción

- **Potencial de Lennard-Jones:** El modelo más común para describir la interacción entre partículas no cargadas. Es importante que los estudiantes entiendan cómo este potencial captura tanto las fuerzas atractivas (a largo alcance) como las repulsivas (a corto alcance) entre las partículas:

$$V(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

Donde ϵ es la profundidad del pozo de potencial y σ es la distancia a la que la energía potencial es cero.

- **Interacciones electrostáticas:** Si es necesario, presenta cómo las interacciones Coulombianas se modelan entre partículas cargadas:

$$V_{\text{Coulomb}}(r) = \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Donde q_1 y q_2 son las cargas, ϵ_0 es la permitividad del vacío y r es la distancia entre las partículas.

Paso 2: Ecuaciones de Movimiento

Las ecuaciones de movimiento son fundamentales para la dinámica molecular. La forma básica de las ecuaciones es:

$$\frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \frac{\mathbf{F}_i}{m_i}$$

Donde \mathbf{r}_i es la posición de la partícula i , m_i es su masa, y \mathbf{F}_i es la fuerza total sobre la partícula, que es la derivada negativa del potencial de interacción:

$$\mathbf{F}_i = -\nabla_i V(\mathbf{r}_i)$$

Paso 3: Métodos Numéricos

Para resolver estas ecuaciones en sistemas con muchas partículas, se utilizan **métodos numéricos**:

- **Método de integración de Verlet:** Es uno de los algoritmos más comunes. Es preciso y eficiente, y calcula la posición y velocidad de las partículas en cada paso temporal Δt .

$$\mathbf{r}_i(t + \Delta t) = 2\mathbf{r}_i(t) - \mathbf{r}_i(t - \Delta t) + \frac{\mathbf{F}_i}{m_i} \Delta t^2$$

Paso 4: Conservación de la Energía

Es importante discutir cómo la **energía total** (cinética + potencial) del sistema debe mantenerse constante (o casi constante, en la práctica) durante la simulación. Cualquier discrepancia puede indicar errores en la simulación (por ejemplo, integradores inadecuados o problemas en el cálculo de las fuerzas).

3. Implementación Práctica y Simulaciones Computacionales

Objetivos:

- Enseñar a los estudiantes cómo implementar simulaciones de dinámica molecular.
- Familiarizarlos con herramientas y software para realizar simulaciones.

Paso 1: Herramientas de Simulación

- **LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator):** Un paquete de simulación ampliamente utilizado que permite realizar simulaciones de dinámica molecular con diversas interacciones y tipos de simulaciones.
- **GROMACS:** Otro software popular para simulaciones de dinámica molecular, especialmente usado en biología molecular y estudios de proteínas.
- **Python:** Usando bibliotecas como **MDTraj** y **ASE (Atomic Simulation Environment)**, los estudiantes pueden realizar simulaciones simples de dinámica molecular en un entorno de programación accesible.

Paso 2: Preparación de una Simulación

- **Creación de la estructura inicial:** Los estudiantes deben aprender a crear una configuración inicial de las partículas (por ejemplo, un conjunto de partículas en un cubo o en una estructura cristalina).
- **Definir el potencial:** Implementar o elegir el potencial adecuado para las interacciones (Lennard-Jones, Coulomb, etc.).
- **Condiciones de frontera:** En sistemas grandes, se usan **condiciones de frontera periódicas** para evitar los efectos de las paredes en las simulaciones.
- **Tiempo de simulación:** Elegir un **paso temporal** adecuado para que las simulaciones sean precisas pero no demasiado costosas computacionalmente.

Paso 3: Ejemplo de Simulación con LAMMPS o Python

Proporciona ejemplos de código sencillo para que los estudiantes realicen su primera simulación.

Ejemplo con **LAMMPS** para simular un gas de partículas interactivas:

```
lammops
Copy code
units lj
atom_style atomic
lattice fcc 0.8442
region box block 0 10 0 10 0 10
create_box 1 box
create_atoms 1 box
mass 1 1.0
pair_style lj/cut 2.5
pair_coeff 1 1 1.0 1.0 2.5
velocity all create 1.0 87287
fix 1 all nve
```

run 1000

Este código crea un sistema de partículas con interacciones de Lennard-Jones y ejecuta una simulación de dinámica molecular en la que las partículas se mueven bajo la evolución de sus fuerzas.

4. Análisis de Resultados

Objetivos:

- Ayudar a los estudiantes a analizar los resultados de las simulaciones.
- Interpretar las propiedades macroscópicas a partir de los datos atómicos generados.

Paso 1: Propiedades Macroscópicas

- **Temperatura:** La temperatura de la simulación se puede calcular a partir de la energía cinética media de las partículas. En sistemas de partículas N , la temperatura se obtiene con:

$$T = \frac{2}{3Nk_B} \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m_i v_i^2$$

- **Presión:** En simulaciones de líquidos y gases, la presión se puede calcular a partir de las interacciones de las partículas con las paredes del sistema.
- **Energía potencial y cinética:** Los estudiantes deben aprender a monitorear la conservación de la energía durante la simulación.

Paso 2: Análisis Visual

- Usar herramientas de visualización (como **VMD** o **OVITO**) para mostrar cómo evolucionan las configuraciones atómicas durante la simulación y cómo se comportan las moléculas en el sistema.
-

5. Evaluación y Actividades Prácticas

Evaluación Teórica

- Preguntas sobre la teoría de dinámica molecular, como la formulación de las ecuaciones de movimiento, los tipos de interacciones moleculares y las leyes de conservación (energía, momentum).

Evaluación Práctica

- Pedir a los estudiantes que implementen simulaciones básicas, cambien los parámetros de los potenciales y analicen los resultados.
- Ejercicios de interpretación de resultados: cálculo de temperatura, presión y energía de un sistema simulado.

Proyecto Final

Los estudiantes pueden realizar un proyecto final que implique una simulación de dinámica molecular más compleja (por ejemplo, un líquido simple o una molécula biomolecular) y analizar las propiedades del sistema.

Conclusión

Enseñar dinámica molecular es un proceso que combina teoría fundamental, habilidades computacionales y la capacidad de interpretar y analizar resultados numéricos. Es esencial que los estudiantes comprendan tanto los principios teóricos detrás de las simulaciones como las herramientas y métodos prácticos necesarios para implementarlas y analizarlas. Además, al incluir ejemplos prácticos y usar simulaciones reales, los estudiantes se familiarizarán rápidamente con el poder y la aplicabilidad de la dinámica molecular en la investigación científica moderna.

Pregunta 3. ¿Como enseñar el equilibrio líquido-vapor con dinámica molecular?

Enseñar el **equilibrio líquido-vapor** usando **dinámica molecular** (MD) es una excelente manera de conectar los conceptos fundamentales de la termodinámica con las simulaciones computacionales. Este enfoque no solo ilustra cómo se modelan las transiciones de fase a nivel atómico, sino también cómo se pueden obtener propiedades macroscópicas de un sistema a partir de su comportamiento microscópico. A continuación te ofrezco una guía paso a paso sobre cómo enseñar este tema:

1. Introducción al Equilibrio Líquido-Vapor

Objetivos Iniciales:

- Explicar el concepto de **equilibrio líquido-vapor** a nivel macroscópico y cómo se puede estudiar desde una perspectiva microscópica usando simulaciones de dinámica molecular.
- Introducir la idea de **transiciones de fase** (de líquido a vapor y viceversa) y cómo se comportan las moléculas en cada fase.

Paso 1: Explicar el Equilibrio Líquido-Vapor

En términos simples, el **equilibrio líquido-vapor** es el estado en el cual la tasa de evaporación (de líquido a vapor) es igual a la tasa de condensación (de vapor a líquido), lo que implica que el número de moléculas en cada fase es constante a una temperatura y presión determinadas. Este equilibrio depende de las **interacciones moleculares** y la **temperatura**.

Paso 2: Introducir la Relación con la Termodinámica

- **Temperatura y presión:** A medida que la temperatura aumenta, las moléculas de líquido adquieren más energía cinética, lo que favorece la evaporación. A una presión constante, esto lleva a un aumento en la cantidad de vapor. En el punto de equilibrio, las fases líquidas y de vapor coexisten.
- **Curva de saturación:** En un diagrama de fases P–T, el equilibrio líquido-vapor aparece como una curva que muestra las condiciones de temperatura y presión a las cuales ambos estados pueden coexistir.

2. Fundamentos de la Dinámica Molecular para el Equilibrio Líquido-Vapor

Objetivos:

- Presentar cómo las simulaciones de dinámica molecular pueden modelar las moléculas en las fases líquidas y de vapor.
- Mostrar cómo obtener propiedades macroscópicas (como la densidad, presión y energía interna) a partir de simulaciones microscópicas.

Paso 1: Modelo de Potencial

En la dinámica molecular, el comportamiento de las moléculas se describe utilizando **potenciales de interacción** que modelan las fuerzas entre átomos o moléculas. Para sistemas líquidos-vapor, los **potenciales de Lennard-Jones** son comúnmente utilizados, ya que capturan tanto las **fuerzas de atracción** como las **fuerzas de repulsión** entre moléculas. El potencial de Lennard-Jones se expresa como:

$$V(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

Donde:

- ϵ es la profundidad del pozo de potencial (energía de interacción a distancia óptima).
- σ es la distancia a la cual la energía potencial es cero.
- r es la distancia entre las partículas.

Este potencial es adecuado para modelar interacciones entre moléculas en gases y líquidos no polares.

Paso 2: Ecuaciones de Movimiento

Las moléculas en una simulación de dinámica molecular se mueven de acuerdo con las ecuaciones de movimiento de Newton, $F=ma$, lo que se traduce en una **integración numérica** de las posiciones y velocidades de las partículas en función del tiempo. En el contexto del equilibrio líquido-vapor, las simulaciones permiten observar cómo las moléculas se comportan en cada fase (líquido o vapor) bajo diferentes condiciones de temperatura y presión.

3. Simulación de Dinámica Molecular para el Estudio del Equilibrio Líquido-Vapor

Objetivos:

- Guiar a los estudiantes en la implementación de simulaciones de dinámica molecular para estudiar el equilibrio líquido-vapor.
- Analizar los resultados obtenidos de las simulaciones, como la distribución de las moléculas en cada fase.

Paso 1: Preparación del Sistema para la Simulación

1. Configuración inicial:

- Crear una caja tridimensional (por ejemplo, un cubo) que contenga moléculas dispuestas aleatoriamente.
- Definir el número de moléculas en el sistema, la densidad inicial y las condiciones de temperatura y presión. En un sistema típico de dinámica molecular, esto se hace mediante la especificación de las condiciones iniciales de velocidad para las partículas y sus posiciones aleatorias.

2. Condiciones de frontera:

- Usualmente se usan **condiciones periódicas de frontera** en las simulaciones de dinámica molecular para simular un sistema “infinito” en el que las moléculas salen por un lado y entran por el otro, evitando efectos de frontera.

3. Ajustar parámetros:

- El paso temporal Δt debe ser pequeño para mantener la precisión en la simulación. Un valor común es 1 femtosegundo (10^{-15} s).
- La temperatura inicial debe estar en el rango de la fase líquida o vapor para observar la transición.

Paso 2: Realizar la Simulación

- Realiza la simulación bajo condiciones controladas de **temperatura** y **presión**. Puedes usar simuladores como **LAMMPS**, **GROMACS**, o incluso **Python** (con paquetes como **MDTraj** y **ASE**) para esta tarea.

Un ejemplo sencillo con **LAMMPS** para simular el equilibrio líquido-vapor podría ser:

Parámetros de simulación

```
units lj
atom_style atomic
lattice fcc 0.8442
region box block 0 10 0 10 0 10
create_box 1 box
create_atoms 1 box
mass 1 1.0
pair_style lj/cut 2.5
pair_coeff 1 1 1.0 1.0 2.5
velocity all create 1.0 87287
fix 1 all nve
thermo 100
run 10000
```

Este código configura un sistema simple de partículas con interacción de Lennard-Jones y ejecuta una simulación para obtener el comportamiento en el tiempo.

Paso 3: Observar el Comportamiento de las Fases

Durante la simulación, es importante monitorear cómo las moléculas se distribuyen en el sistema:

- **Fase líquida:** Las moléculas se mantienen agrupadas, con una alta densidad y un movimiento relativamente limitado.
- **Fase de vapor:** Las moléculas están más dispersas, moviéndose libremente a través del espacio.
- **Equilibrio líquido-vapor:** Observa cómo, con el tiempo, se establece un equilibrio entre la fase líquida y la fase vapor, con moléculas que constantemente se evaporan y se condensan.

4. Análisis de Resultados

Objetivos:

- Enseñar a los estudiantes cómo analizar los datos obtenidos de la simulación.

- Interpretar cómo las propiedades macroscópicas (como la densidad y la presión) se relacionan con las fases líquida y vapor.

Paso 1: Propiedades Macroscópicas

Durante la simulación, es importante calcular varias propiedades macroscópicas:

- **Densidad:** La densidad de cada fase (líquido y vapor) se puede obtener calculando el número de moléculas por volumen.

$$\rho = \frac{N}{V}$$

- donde N es el número de moléculas y V es el volumen.
- **Presión:** La presión también se puede calcular en simulaciones de dinámica molecular mediante la ecuación de estado o el formalismo de la presión de virial.
- **Energía interna:** El cambio en la energía interna durante la simulación puede ayudar a verificar si se ha alcanzado el equilibrio térmico.

Paso 2: Diagramas de Fase

Los estudiantes pueden generar un **diagrama de fase** P–T a partir de los resultados de simulaciones. Este diagrama muestra cómo la temperatura y la presión afectan las transiciones entre las fases líquida y vapor.

Paso 3: Análisis Visual de la Simulación

- Utilizar herramientas de visualización como **VMD**, **OVITO**, o **PyMOL** para observar cómo las moléculas se distribuyen en el espacio. Las simulaciones visuales permiten ver cómo se forma el **interfaz líquido-vapor** en el sistema.

5. Actividades Complementarias y Evaluación

Actividades Prácticas

- **Experimentos de simulación:** Los estudiantes pueden realizar simulaciones variando los parámetros (como la temperatura o la presión) y observar cómo afecta el comportamiento del sistema (líquido-vapor).
- **Análisis de resultados:** Pide a los estudiantes que calculen la densidad y la presión en el equilibrio y tracen un gráfico $\rho(T)$ para el sistema.

Evaluación

- **Evaluación Teórica:** Preguntas sobre el equilibrio líquido-vapor, los conceptos de transición de fase, y cómo las interacciones moleculares afectan al equilibrio.
- **Evaluación Práctica:** Los estudiantes deben realizar una simulación, analizar los resultados y explicar cómo se manifiestan las fases líquidas y vapor en términos de las interacciones moleculares y la termodinámica.

Conclusión

Enseñar el **equilibrio líquido-vapor** mediante **dinámica molecular** ofrece una oportunidad única para que los estudiantes comprendan las transiciones de fase desde una perspectiva microscópica, utilizando simulaciones computacionales. A través de esta metodología, los estudiantes no solo aprenden sobre el equilibrio termodinámico, sino que también adquieren habilidades prácticas para analizar sistemas complejos y aplicar principios fundamentales de la física y la química computacional.

Pregunta 4. La tensión superficial con dinámica molecular

Enseñar la **tensión superficial** mediante **dinámica molecular** (MD) es una excelente forma de conectar conceptos macroscópicos, como las fuerzas intermoleculares y la energía de superficie, con simulaciones a nivel atómico. La tensión superficial es una propiedad clave de los líquidos que describe la energía necesaria para aumentar la superficie de un líquido o la fuerza que actúa a lo largo de la superficie de un líquido en contacto con otro medio (como el aire).

La dinámica molecular ofrece una manera poderosa de investigar la tensión superficial al permitirnos simular el comportamiento de moléculas en la superficie de un líquido y cómo interactúan con las moléculas dentro del líquido y con las del aire o el entorno circundante.

1. Introducción a la Tensión Superficial

Objetivos Iniciales:

- Explicar el concepto físico de la tensión superficial en términos macroscópicos.
- Relacionar la tensión superficial con las interacciones a nivel molecular y cómo estas afectan el comportamiento de las moléculas en la superficie del líquido.
- Mostrar cómo se puede calcular la tensión superficial a partir de simulaciones de dinámica molecular.

Paso 1: Qué es la Tensión Superficial

La **tensión superficial** se puede describir como la tendencia de un líquido a minimizar su área superficial debido a las fuerzas intermoleculares. A nivel macroscópico, se puede definir como la **fuerza por unidad de longitud** que actúa a lo largo de la superficie de un líquido en contacto con otro medio (como el aire o un sólido). Se puede expresar como:

$$\gamma = \frac{F}{L}$$

donde:

- γ es la tensión superficial,
- F es la fuerza tangencial sobre la superficie,
- L es la longitud de la línea sobre la que actúa la fuerza.

Paso 2: Relación con las Fuerzas Intermoleculares

En términos microscópicos, la tensión superficial surge de las interacciones entre las moléculas de un líquido. Las moléculas en el interior del líquido experimentan una atracción hacia las moléculas circundantes en todas las direcciones. Sin embargo, las moléculas en la superficie están expuestas a fuerzas de atracción solo en las direcciones hacia el interior del líquido, lo que genera una "tensión" que minimiza el área superficial.

2. Fundamentos Teóricos para Simular la Tensión Superficial con Dinámica Molecular

Objetivos:

- Introducir cómo las interacciones moleculares y el potencial de Lennard-Jones afectan la tensión superficial.
- Explicar cómo se puede calcular la tensión superficial en simulaciones de dinámica molecular.

Paso 1: Interacciones Moleculares

La tensión superficial depende de las interacciones intermoleculares entre las moléculas del líquido, que generalmente se modelan utilizando un **potencial de Lennard-Jones**. Este potencial tiene dos términos: uno de atracción a largo alcance (conforme a r^{-6}) y uno de repulsión a corto alcance (conforme a r^{-12}):

$$V(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

Donde ϵ es la profundidad del pozo de potencial y σ es la distancia a la que la energía potencial es cero.

Paso 2: Fórmulas para la Tensión Superficial

Una forma común de calcular la tensión superficial en simulaciones de dinámica molecular es usar el método basado en la **fuerza interfacial**. Se puede calcular la tensión superficial utilizando la **presión de la interfaz** a través de un enfoque de la **método de la virial de presión**.

La tensión superficial γ se puede obtener mediante la relación:

$$\gamma = \frac{1}{2} \left(\int_{\text{superficie}} \mathbf{F} \cdot \hat{n} dA \right)$$

Donde \mathbf{F} es la fuerza sobre las moléculas en la interfaz líquido-aire, \hat{n} es el vector normal a la superficie, y dA es un elemento de área a lo largo de la superficie. En las simulaciones, esto puede ser evaluado con la ayuda de las **fuerzas de presión** calculadas a lo largo de la superficie del líquido.

3. Simulación de la Tensión Superficial con Dinámica Molecular

Objetivos:

- Enseñar a los estudiantes cómo realizar simulaciones para estudiar la tensión superficial en líquidos.
- Analizar los resultados obtenidos de la simulación.

Paso 1: Preparación del Sistema

1. Configuración inicial del sistema:

- Crea un sistema de moléculas de un líquido, como agua o argón, en una caja tridimensional. La fase líquida se debe generar mediante una densidad adecuada.
- Coloca un espacio vacío (vacío o aire) sobre el líquido para modelar la interfaz entre el líquido y el aire.

2. Condiciones de frontera:

- Usa **condiciones periódicas de frontera** en las direcciones laterales (x e y) para simular un sistema de "superficie infinita". En la dirección vertical (z), se puede usar una **pared rígida** o dejar un vacío para representar la interfase líquido-aire.

3. Potenciales de interacción:

- Usa un **potencial de Lennard-Jones** para las interacciones entre las moléculas del líquido. También se puede definir un potencial diferente para la interacción entre las moléculas del líquido y las del aire (a menudo se considera que la interacción es más débil o despreciable).

4. Parámetros de simulación:

- Selecciona un paso temporal pequeño (Δt) y una temperatura que se encuentre dentro del rango del líquido o en su punto crítico.
- La simulación debe correr por suficiente tiempo para que las moléculas en la superficie se reorganicen y el sistema alcance un estado de equilibrio dinámico.

Paso 2: Realizar la Simulación

- Corre la simulación utilizando un software de dinámica molecular como **LAMMPS**, **GROMACS**, o **HOOMD-blue**. Asegúrate de que la simulación se ejecute durante el

tiempo suficiente para observar cómo las moléculas en la superficie se distribuyen y alcanzan un estado de equilibrio.

Paso 3: Cálculo de la Tensión Superficial

Una vez que la simulación haya alcanzado el equilibrio, se puede calcular la tensión superficial observando las moléculas en la interfaz entre el líquido y el aire. Hay varios métodos para calcular la tensión superficial en dinámica molecular, y los más comunes son:

- **Método de la virial de presión:** Calcula la presión en la dirección normal a la interfaz y usa la **fuerza interfacial** para obtener la tensión superficial.
- **Método de la simetría de la densidad:** En algunos casos, la distribución de la densidad a través de la interfaz líquida-aire muestra un perfil claro que puede usarse para calcular la energía superficial y, finalmente, la tensión superficial.

4. Análisis de Resultados

Objetivos:

- Enseñar a los estudiantes cómo analizar los resultados de la simulación para obtener la tensión superficial.
- Comparar los resultados obtenidos con valores experimentales.

Paso 1: Cálculo de la Densidad a través de la Superficie

- A partir de los resultados de la simulación, observa cómo cambia la **densidad** de las moléculas en la dirección normal a la interfaz (entre el líquido y el aire). Las moléculas en el aire tendrán una densidad muy baja, mientras que las moléculas en el líquido tendrán una densidad más alta.
- La **distribución de la densidad** a través de la interfaz se utiliza para calcular la **energía superficial** de las moléculas en la superficie.

Paso 2: Comparar con Datos Experimentales

- Los resultados obtenidos de la simulación de dinámica molecular deben compararse con los valores experimentales de tensión superficial para el líquido correspondiente (por ejemplo, agua a 298 K tiene una tensión superficial de aproximadamente 72 mN/m).
- La comparación de los valores numéricos obtenidos por MD con los valores experimentales permite evaluar la precisión del modelo y el tipo de potencial utilizado.

Paso 3: Visualización de la Simulación

- Usar herramientas como **VMD**, **OVITO**, o **PyMOL** para visualizar las moléculas en la superficie y observar cómo las moléculas en la interfaz están más ordenadas que las moléculas dentro del líquido.

5. Actividades Complementarias y Evaluación

Actividades Prácticas

- **Experimentos de simulación:** Los estudiantes pueden variar los parámetros de la simulación, como la temperatura o el tamaño del sistema, y observar cómo esto afecta a la tensión superficial.
- **Cálculo de la tensión superficial:** Los estudiantes deben calcular la tensión superficial a partir de los resultados de simulaciones y compararlos con los valores experimentales.

Evaluación

- **Evaluación teórica:** Preguntas sobre la definición de la tensión superficial, su relación con las interacciones moleculares y los métodos para calcularla a partir de simulaciones.
- **Evaluación práctica:** Los estudiantes deben realizar simulaciones, analizar la distribución de densidad en la interfaz y calcular la tensión superficial utilizando el método adecuado.

Conclusión

Enseñar la **tensión superficial** mediante simulaciones de **dinámica molecular** permite que los estudiantes comprendan cómo las interacciones a nivel atómico dan lugar a propiedades macroscópicas como la tensión superficial. Además, este enfoque ayuda a desarrollar habilidades en simulaciones computacionales y en el análisis de resultados numéricos, lo que es fundamental para estudios avanzados en física, química y ciencia de materiales.

Pregunta 5. ¿Como enseñar el plegamiento en proteínas con dinamica molecular?

Enseñar el **plegamiento de proteínas** utilizando **dinámica molecular (MD)** es una manera fascinante y poderosa de conectar conceptos biológicos, físicos y computacionales. El plegamiento de proteínas es un proceso biológico clave en la biología molecular y la bioquímica, y simularlo mediante dinámicas moleculares permite a los estudiantes comprender cómo las interacciones atómicas y moleculares determinan la estructura final de una proteína funcional. A continuación, te proporciono una guía detallada sobre cómo enseñar este tema, incluyendo los fundamentos teóricos, los métodos computacionales y las herramientas necesarias.

1. Introducción al Plegamiento de Proteínas

Objetivos Iniciales:

- Explicar el concepto de **plegamiento de proteínas** a nivel molecular.

- Introducir la relación entre la secuencia de aminoácidos y la estructura tridimensional final de la proteína.
- Presentar la **dinámica molecular** como una herramienta para simular y estudiar el plegamiento.

Paso 1: Qué es el Plegamiento de Proteínas

El **plegamiento de proteínas** es el proceso por el cual una cadena de aminoácidos (su secuencia primaria) se pliega en una estructura tridimensional específica, la cual es esencial para su función biológica. Este proceso está gobernado principalmente por las **interacciones moleculares** entre los átomos de la proteína, que incluyen:

- **Fuerzas de Van der Waals**
- **Puentes de hidrógeno**
- **Interacciones hidrofóbicas**
- **Interacciones iónicas**

El plegamiento no es un proceso aleatorio, sino que ocurre de forma espontánea, debido a la minimización de la **energía libre del sistema**.

Paso 2: Conceptos Clave

- **Estructuras de las proteínas:**
 - **Estructura primaria:** Secuencia de aminoácidos.
 - **Estructura secundaria:** Hélices alfa, láminas beta, giros y bucles.
 - **Estructura terciaria:** Plegamiento completo en 3D de la cadena polipeptídica.
 - **Estructura cuaternaria:** Agrupación de varias cadenas polipeptídicas (en proteínas multitéricas).

El plegamiento de proteínas es crucial para la función biológica. Un mal plegamiento puede resultar en enfermedades como el **Alzhéimer** o la **fibrosis quística**.

2. Fundamentos de la Dinámica Molecular para el Estudio del Plegamiento

Objetivos:

- Explicar cómo las simulaciones de dinámica molecular pueden modelar el plegamiento de proteínas.
- Introducir las **fuerzas intermoleculares** que gobiernan la formación de estructuras proteicas.

Paso 1: Potenciales de Interacción y Modelos

Para simular el plegamiento de proteínas con dinámica molecular, se necesita un modelo de las interacciones entre los átomos de la proteína. Los **potenciales de interacción** describen estas

fuerzas y son esenciales para predecir cómo las moléculas se mueven y se organizan durante el proceso de plegamiento.

Algunos modelos comunes incluyen:

- **Modelo de Lennard-Jones:** Para representar interacciones de repulsión y atracción a corto alcance.
- **Puentes de hidrógeno:** Modelados explícitamente, ya que son fundamentales para la estabilidad estructural de las proteínas.
- **Interacciones iónicas:** Para cargas positivas y negativas entre grupos de aminoácidos.
- **Solventes:** El agua juega un papel crucial en el plegamiento, y a menudo se modela mediante modelos como el **modelo TIP3P** o **SPC/E** para simular el solvente.

Un modelo comúnmente utilizado es el **modelo de campos de fuerza** (force fields), como **CHARMM**, **AMBER** o **GROMOS**, que proporcionan parámetros para las interacciones atómicas y moleculares dentro de la proteína.

Paso 2: Métodos de Dinámica Molecular

En dinámica molecular, las moléculas (en este caso, las proteínas) se modelan como sistemas de partículas (átomos) que interactúan entre sí mediante fuerzas. Las ecuaciones de movimiento de Newton se resuelven numéricamente para obtener las posiciones y velocidades de las partículas a lo largo del tiempo. El proceso general incluye:

- **Energía potencial:** Se calcula a partir de las interacciones entre átomos y moléculas.
- **Energía cinética:** Relacionada con el movimiento de las partículas.
- **Termodinámica:** La simulación busca minimizar la energía libre del sistema para alcanzar la conformación más estable (es decir, la forma plegada de la proteína).

3. Simulaciones de Plegamiento de Proteínas

Objetivos:

- Guiar a los estudiantes a través del proceso de simular el plegamiento de proteínas utilizando herramientas de dinámica molecular.
- Analizar los resultados para observar cómo la proteína alcanza su conformación final.

Paso 1: Preparación del Sistema

1. **Selección de una proteína:** Comienza con una proteína pequeña y bien estudiada, como **la proteína A** o **el dominio de la proteína de la ribonucleasa**. Para empezar, una proteína simple permite centrarse en los métodos de simulación sin complicar demasiado el análisis.

2. **Modelado inicial:** Utiliza bases de datos como el **Protein Data Bank (PDB)** para obtener la estructura inicial de la proteína. A partir de allí, se puede hacer una simulación para observar cómo esta estructura cambia en el tiempo y cómo se pliega.
3. **Preparación de la caja de simulación:** El sistema debe incluir la proteína en un solvente (agua o solución iónica). La caja de simulación debe tener las dimensiones adecuadas para permitir el movimiento libre de la proteína, y las condiciones de frontera deben ser apropiadas para evitar efectos de frontera (por ejemplo, utilizando condiciones periódicas).
4. **Definición de parámetros de simulación:**
 - El paso temporal Δt suele ser de 1-2 fs (femtosegundos) para garantizar la precisión.
 - La temperatura inicial debe ser adecuada, y la simulación debe llevarse a cabo bajo condiciones de equilibrio térmico.
5. **Tiempos de simulación:** Los plazos de simulación para observar el plegamiento de proteínas deben ser largos. El plegamiento de proteínas puede llevar miles o incluso millones de pasos de simulación.

Paso 2: Realizar la Simulación

Una vez preparado el sistema, se lleva a cabo la simulación de dinámica molecular. Durante la simulación, la proteína debe comenzar a **interactuar consigo misma** (es decir, las interacciones entre los residuos de la proteína deben hacer que la cadena se pliegue de forma espontánea en la estructura más estable).

Paso 3: Métodos de Plegamiento y Exploración del Espacio Conformacional

Existen varias técnicas que se pueden usar para estudiar el plegamiento de proteínas mediante dinámica molecular:

1. **Simulación de dinámica molecular tradicional:** Ejecuta la simulación bajo condiciones de temperatura constante (NVT o NPT) y observa cómo la proteína se pliega en la estructura más estable.
2. **Métodos de simulación de Monte Carlo:** Usados en combinación con la dinámica molecular, estos métodos permiten explorar de manera eficiente el espacio conformacional de la proteína sin necesidad de seguir una trayectoria específica.
3. **Simulación de ensayos de refolding y unfolding:** Para estudiar la reversibilidad del plegamiento, se pueden aplicar cambios de temperatura (simulaciones de desnaturalización) y luego hacer el proceso inverso para ver cómo se vuelve a plegar.
4. **Métodos de replica exchange o metadynamics:** Estas son técnicas avanzadas que pueden ayudar a explorar el espacio conformacional más rápidamente y evitar que el sistema quede atrapado en mínimos locales de energía (conformaciones no plegadas).

Paso 4: Análisis de Resultados

Una vez finalizada la simulación, los estudiantes pueden realizar un análisis para observar cómo la proteína alcanza su conformación plegada:

- **Energía potencial:** Observar cómo disminuye la energía potencial a medida que la proteína se pliega.
 - **Diagrama de la estructura terciaria:** Analizar la conformación final de la proteína y compararla con la estructura experimental (si está disponible).
 - **RMSD (Root Mean Square Deviation):** Esta métrica se utiliza para cuantificar cómo cambia la estructura a lo largo de la simulación, especialmente para ver cuánto se aleja la proteína de su estructura inicial durante el proceso de plegamiento.
 - **RMSF (Root Mean Square Fluctuation):** Para estudiar la flexibilidad de las diferentes regiones de la proteína durante la simulación.
-

4. Herramientas para la Simulación de Plegamiento de Proteínas

Objetivos:

- Familiarizar a los estudiantes con las herramientas más utilizadas para simular el plegamiento de proteínas.

Paso 1: Herramientas de Simulación

1. **GROMACS:** Un software de simulación de dinámica molecular muy utilizado en biología computacional. Permite realizar simulaciones de proteínas en soluciones y estudiar el plegamiento.
2. **AMBER:** Otro software popular, con una base de datos de campos de fuerza y herramientas específicas para la simulación de sistemas biológicos.
3. **CHARMM:** Un conjunto de programas utilizados para simular biomoléculas, que incluye campos de fuerza para proteínas.
4. **NAMD:** Software eficiente para simulaciones de grandes sistemas biomoleculares, compatible con otras plataformas de simulación como VMD (visualización molecular).

Paso 2: Visualización de la Simulación

La visualización es crucial para entender los procesos de plegamiento:

- **VMD (Visual Molecular Dynamics):** Una herramienta para visualizar estructuras moleculares y análisis de trayectorias de simulación.
- **PyMOL:** Para la visualización y análisis estructural de proteínas.

5. Evaluación y Actividades Complementarias

Evaluación

- **Preguntas teóricas:** Evaluar el conocimiento sobre las interacciones moleculares, el proceso de plegamiento y las herramientas computacionales utilizadas.
- **Análisis de resultados de simulación:** Los estudiantes deben analizar las trayectorias de simulación, calcular RMSD y RMSF, y evaluar cómo la proteína se pliega.

- **Informe práctico:** Los estudiantes deben escribir un informe sobre la simulación, describiendo el proceso de plegamiento y comparando los resultados con estructuras experimentales.

Actividades complementarias

- **Estudio de proteínas disfuncionales:** Analizar cómo los errores en el plegamiento de proteínas pueden estar relacionados con enfermedades como el Alzheimer.
- **Simulaciones en tiempo real:** Hacer simulaciones de plegamiento en clase usando software como GROMACS o NAMD.

Conclusión

Enseñar el **plegamiento de proteínas** mediante **dinámica molecular** permite a los estudiantes explorar este proceso a nivel molecular y entender cómo las interacciones entre los aminoácidos determinan la estructura y función de las proteínas. Al usar simulaciones computacionales, los estudiantes no solo aprenden los principios fundamentales de la biología molecular, sino también adquieren habilidades valiosas en la modelización y simulación de sistemas complejos.