
 UNIVERSIDAD PEDAGÓGICA NACIONAL <small>Escuela de Pedagogía</small>	FORMATO	
	RESUMEN ANALÍTICO EN EDUCACIÓN - RAE	
Código: FOR020GIB	Versión: 01	
Fecha de Aprobación: 10-10-2012	Página 1 de 4	

1. Información General	
Tipo de documento	Trabajo de grado
Acceso al documento	Universidad Pedagógica Nacional. Biblioteca Central
Título del documento	Diseño de un software por medio de dinámica molecular (DM) para la explicación del comportamiento de gases clásicos.
Autor(es)	Andrés Garzón Mayorga
Director	Néstor Fernando Méndez Hincapié
Publicación	Bogotá, Universidad Pedagógica Nacional (U.P.N), 2014. 48p
Unidad Patrocinante	Universidad Pedagógica Nacional (U.P.N)
Palabras Claves	Dinámica molecular, mecánica estadística, gases.

2. Descripción
<p>El continuo crecimiento de los ordenadores, el cual se ha dado desde la década de los 50, así como su aplicación a la solución de diversos problemas científicos, ha originado un hecho que algunos han denominado una tercera metodología de investigación científica: <i>la simulación por ordenador</i>. Generalmente, cualquier fenómeno físico se puede estudiar haciendo uso de tres metodologías: la experimentación, la formulación de modelos teóricos y el uso de las simulaciones. El fin de una simulación por ordenador es dar solución a modelos teóricos de gran complejidad, mediante el uso de los métodos numéricos.</p> <p>En el área de la física, la simulación por ordenador fue introducida en la década de los 50 con el fin de estudiar y analizar sistemas compuestos por muchos cuerpos con el trabajo de Metropolis, el cual se realizó en el ordenador de “Los Alamos”. La primera simulación numérica la cual modeló el comportamiento de un líquido se hizo mediante un método que consistió en generar números aleatorios, a este método se le dio el nombre de MonteCarlo, nombre inspirado en los casinos existentes en aquella ciudad. En esa misma década, en el año 1957, Alder y Wainright realizaron una investigación sobre el diagrama de fases de esferas duras mediante una simulación por dinámica molecular, a diferencia del método de Montecarlo, este método es de corte determinístico y se basa en la solución de las ecuaciones de Newton del movimiento. Para esto se utilizaron ordenadores UNIVAC e IBM 704.</p> <p>A partir de aquel momento, los métodos de dinámica molecular y Montecarlo han tenido una enorme aplicación a una gran cantidad de problemas, siendo empleados con éxito para simular sistemas compuestos por una gran cantidad de partículas (gases, líquidos, sólidos), extendiéndose mediante el desarrollo de nuevos algoritmos en forma paralela al avance tecnológico de los ordenadores.</p>

 UNIVERSIDAD PEDAGÓGICA NACIONAL <small>Escuela de Pedagogía</small>	FORMATO
	RESUMEN ANALÍTICO EN EDUCACIÓN - RAE
Código: FOR020GIB	Versión: 01
Fecha de Aprobación: 10-10-2012	Página 2 de 4

3. Fuentes

Allen, M., Tildesley, D. (1987). Computer simulation of liquid. *Clarendon Press, Oxford.*

Alonso, M., Finn, E. (1995). Física Vol III: Fundamentos cuánticos y estadísticos. *Addison-Wesley Iberoamérica.*

Amaya R, Sebastián. (2011). Modelación y simulación de propiedades mecánicas de multicapas de Cr/CrN: Tesis presentada como requisito parcial para optar por el título de magister en física. *Universidad Nacional de Colombia.*

Campos, D. (2004). Elementos de mecánica estadística. *Universidad Nacional de Colombia.*

Casares A, Nidia Del Carmen (2011). La dinámica molecular y la termodinámica estadística: una propuesta pedagógica para abordar los conceptos básicos de la termodinámica en cursos de media vocacional. Tesis de maestría. Universidad Nacional de Colombia.

Frenkel, D., Smit, B. (2002). Understanding molecular simulation from algorithms to applications. *Amsterdam: Academic Press.*

García Colín, L. (2002). temas selectos de física estadística 1. *El Colegio Nacional, Mexico DF.*

Gould, H., Tobochnik, J. (2007). An Introduction to computer simulation methods: Applications to physical systems, third edition. *Pearson addison-Wesley.*

Gould, H., Tobochnik, J. (2010). Statistical and thermal physics: with computer applications, third edition. *Pearson addison-Wesley.*

Landau, L., Lifshitz, E. (1950). Cursro de física teórica: Vol V, física estadística. *Reverté S.A.*


Levich, B. G. (1985). Curso de física teórica: Vol II, física estadística. *Reverté S.A.*

Muller, I. (2006). A history of thermodynamics. *Springer.*

Raffi-Tabbar, H., Mansoori, G. (2003). Interatomic potential models for microstructures. *In ensiclopedia of Nanoscience and Nanotecnology (pp. 1-17). Chicago: H.S.Nalwa.*

Reif, F. (1965). Fundamentos de física estadística y térmica. *McGraw Hill Book Company.*

Salinger, G. L., Sears, F. W. (1978). Termodinámica, teoría cinética y termodinámica estadística. *Reverté S.A.*

 UNIVERSIDAD PEDAGÓGICA NACIONAL <small>Escuela de Estadística</small>	FORMATO
	RESUMEN ANALÍTICO EN EDUCACIÓN - RAE
Código: FOR020GIB	Versión: 01
Fecha de Aprobación: 10-10-2012	Página 3 de 4

4. Contenidos

1. Ideas fundamentales de los gases

Se inicia este capítulo hablando brevemente del concepto de gas, para luego entrar a definir el sistema estadístico más simple: *el gas ideal* (o en algunas obras denominado: el gas perfecto), abarcado el anterior concepto se deduce la ecuación de estado de dicho sistema. Posterior al estudio de los gases ideales, se estudian los sistemas de partículas interactuantes, los gases reales (en algunas obras llamado: el gas imperfecto) y similar a la sección anterior se hace énfasis en su ecuación de estado: *la ecuación de Van Der Waals* y la ecuación de virial.

2. Fundamentos de mecánica estadística clásica

Este capítulo inicia con el concepto de equilibrio estadístico, abarcado este concepto se deduce una relación muy importante: *la ley de distribución de Maxwell-Boltzmann* (caso general), para luego entrar a estudiar una aplicación del gas ideal: el concepto de *distribución de velocidades*. Después de estudiar los casos generales, se hace estudio del caso particular de dicha distribución de velocidades: caso en 2D, parte que se tendrá en cuenta en este trabajo en el capítulo de análisis y resultados.


3. Dinámica molecular

Este capítulo constituye la parte fundamental de este trabajo, se inicia hablando sobre dicho simulación, posterior a ello se hablan sobre los elementos que constituyen tal simulación: el potencial intermolecular y el algoritmo de integración en el tiempo, se finaliza este capítulo hablando del uso de las unidades reducidas en una simulación de DM y se presenta una tabla de unidades reducidas para un gas de argón.

4. Análisis y resultados

Abordado el marco teórico que comprende los tres capítulos mencionados anteriormente, ya se está preparado para hablar sobre la simulación por dinámica molecular realizada por el autor. En la parte de análisis, se habla sobre la construcción de las dos simulaciones: la de gas ideal y la de un gas bajo interacciones moleculares y se tienen en cuenta aspectos como: el lenguaje de programación en que se diseñó, las variables que se tuvieron en cuenta y las diferentes rutinas y subrutinas principales.

Finalmente, en la parte de resultados se realizan los diagramas de presión VS temperatura para las dos simulaciones, un diagrama de presión VS volumen para la simulación de gas ideal y las distribuciones de velocidades, los resultados que arrojan ambas simulaciones son comparados y contrastados con la teoría en general.

 UNIVERSIDAD PEDAGÓGICA NACIONAL <small>Excelencia en la Educación</small>	FORMATO	
	RESUMEN ANALÍTICO EN EDUCACIÓN - RAE	
Código: FOR020GIB	Versión: 01	
Fecha de Aprobación: 10-10-2012	Página 4 de 4	

5. Metodología
<p>La metodología usada en este trabajo es de corte <i>cuantitativo-comparativo</i>, ya que no solo tiene como objetivo medir, sino comparar. Inicialmente se hace una revisión extensa de la literatura para luego observar los datos arrojados por el programa de computo (simulación por dinámica molecular construida por el autor), abarcados estos dos aspectos se realizan los respectivos procesos de comparación y se observa finalmente si la simulación arroja los resultados esperados, acorde con los modelos teóricos.</p>

6. Conclusiones
<ol style="list-style-type: none"> 1. Se diseñó un programa de cómputo que simula la interacción molecular en dos dimensiones de partículas que interactúan bajo el potencial de Lennard-Jones, mostrando específicamente el comportamiento de la distribución de velocidades que permite contrastarse con la del gas ideal. 2. El programa calcula la presión asumiendo choques completamente elásticos con las paredes del recipiente arrojando resultados estables acorde a lo esperado. 3. El programa utilizó como integrador de movimiento el método de velocidad de Verlet optimizado, pero es posible utilizar otros más sencillos o más complejos dependiendo de los objetivos que se quieran alcanzar. 4. Con el programa diseñado y la metodología expuesta en este Trabajo, para realizar las gráficas de presión contra temperatura y de los histogramas, pueden ser utilizadas para la enseñanza de la física estadística en los temas de gases reales. Se sugiere que en la medida que se tengan computadoras más potentes se trabaje con un mayor número de partículas que permitan obtener histogramas más finos.

Elaborado por:	Andrés Garzón Mayorga
Revisado por:	Néstor Fernando Méndez Hincapié

Fecha de elaboración del Resumen:	3	12	2014
--	---	----	------