



*1821 Universidad de Buenos Aires*

## **Resolución Consejo Directivo**

**Número:**

**Referencia:** EX-2022-04764041- -UBA-DMESA#FCEN - POSTGRADO - SESIÓN  
05/09/2022

---

### **VISTO:**

La nota presentada por la Dirección del Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física, mediante la cual eleva la información del curso de posgrado Escuela de Modelado de Materiales para el año 2022,

### **CONSIDERANDO:**

lo actuado por la Comisión de Doctorado,  
lo actuado por la Comisión de Posgrado,  
lo actuado por este Cuerpo en la sesión realizada en el día 5 de septiembre de 2022  
en uso de las atribuciones que le confiere el Artículo 113° del Estatuto Universitario,

## **EL CONSEJO DIRECTIVO DE LA FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES R E S U E L V E:**

**ARTÍCULO 1°:** Aprobar el nuevo curso de posgrado Escuela de Modelado de Materiales de 80 horas de duración, que será dictado por el Dr. Damian Scherlis con la colaboración de los Dres. Darío A. Estrin, Leandro Martinez, Ariel Zeida, Luciana

Capece, Mariano C. González Lebrero, Verónica M. Sanchez, Matías Factorovich, Estefania González Solveyra, Adrian Roitberg.

**ARTÍCULO 2°:** Aprobar el programa del curso de posgrado Escuela de Modelado de Materiales que como anexo forma parte de la presente Resolución, para su dictado en agosto de 2022.

**ARTÍCULO 3°:** Aprobar un puntaje máximo de tres (3) puntos para la Carrera del Doctorado.

**ARTÍCULO 4°:** Establecer que el mencionado curso de posgrado no será arancelado ( CATEGORÍA 1).

**ARTÍCULO 5°:** Disponer que de no mediar modificaciones en el programa, la carga horaria y el arancel, el presente Curso de Posgrado tendrá una vigencia de cinco (5) años a partir de la fecha de la presente Resolución.

**ARTÍCULO 6°:** Comuníquese a todos los Departamentos Docentes, a la Dirección de Estudiantes y Graduados, a la Biblioteca de la FCEyN y a la Secretaría de Posgrado con copia del programa incluida. Cumplido, pase QINORGANICA#FCEN y resérvese.

## **ANEXO**

### **Programa**

#### **Escuela de Modelado de Materiales**

- 1) Concepto de simulación computacional en Ciencia: relación entre experimento, teoría y simulación. Simulación molecular en Química, Bioquímica y Materiales. Modelos existentes para la determinación de la superficie de energía potencial. Planteo de estrategias de simulación para responder interrogantes de interés químico y bioquímico.
- 2) Métodos ab-initio. Ecuaciones de Hartree-Fock. Funciones de base. Determinación de propiedades moleculares. Métodos semiempíricos. Idea general e implementaciones CNDO, MNDO, INDO. Modelos semiempíricos basados en parametrización: Métodos AM1 y PM3. Teoría del funcional de la densidad. Teoremas fundamentales. Implementación de Kohn y Sham. Rango de aplicabilidad, ventajas y desventajas de las distintas técnicas de estructura electrónica.
- 3) Métodos de campos de fuerzas parametrizados. Modelos de solvente, explícitos, implícitos, modelos de agua (TIP3P, TIP4P, SPC, modelos de carga fluctuante). Campos de fuerzas para biomoléculas. Potenciales AMBER y CHARMM. Construcción de un Campo de Fuerzas y Derivación de parámetros (Parámetros de unión y no-unión y

- determinación de cargas parciales mediante ajuste a potencial electrostático).
- 4) Termodinámica estadística. Conceptos básicos. Aplicación a técnicas de simulación. Ensamblados. Función de partición y propiedades termodinámicas. Hipótesis ergódica. Esquema de simulación de Monte Carlo. Esquema de Dinámica Molecular. Detalles técnicos. Métodos de integración de las ecuaciones de Newton para la dinámica molecular. Ejemplos de simulaciones de Monte Carlo y Dinámica Molecular. Determinación de propiedades estructurales y dinámicas. Termostatos (Berendsen, Nose). Dinámica de Langevin.
  - 5) Cálculos de energía libre: Funciones termodinámicas Energía y Entropía. Métodos de muestreo sesgado (Umbrella Sampling). Métodos basados en transformaciones termodinámicas (integración termodinámica, teoría de perturbaciones FEP). Dinámica Molecular Guiada y aproximaciones de no equilibrio, relación entre trabajo y reversibilidad: ecuación (igualdad) de Jarzynski. Violaciones a la segunda ley. Muestreo de ligando implícito (ILS). Metadinámica.
  - 6) Métodos de multi escala. Modelado de fenómenos reactivos. Efectos del entorno. Modelos del continuo. Esquemas de Onsager y esquema PCM. Métodos híbridos cuántico-clásico (QM-MM). Esquemas aditivos. Acoplamiento entre subsistemas. Esquemas sustractivos (Oniom).
  - 7) Cálculo de Materiales. Estructura electrónica de sistemas extendidos: polímeros, sólidos y superficies. Funciones de Bloch. Diagramas de bandas y nivel de Fermi. Densidad de estados. Implementación metodológica: funciones de base deslocalizadas y pseudopotenciales. Cálculo de la energía superficial, reconstrucciones, función trabajo, energía de adsorción. Solvente continuo.
  - 8) Magnetismo dentro del formalismo DFT y herramientas de cálculo para el estudio de sistemas polarizados en spin. Mapeo de las interacciones magnéticas en modelos de Heisenberg. Materiales que requieren extensiones al intercambio y correlación: aproximación DFT+U. El caso de los óxidos simples y el rol de las vacancias de oxígeno en sus propiedades magnéticas. El ejemplo de los nitruros y el rol de las impurezas magnéticas.
  - 9) Métodos del continuo en materiales y en nanoestructuras. Cálculo de propiedades termodinámicas y estructurales en sistemas híbridos formados por nanomateriales y materia blanda a través de teorías de campo medio

#### Bibliografía:

- Modern Quantum Chemistry. A. Szabo y S. Ostlund. Ed. Dover, 1996
- Electronic Structure Calculations for Solids and Molecules. J. Kohanoff. Cambridge University Press, 2006
- Understanding Molecular Simulations. D. Frenkel y B. Smit. Academic Press, 2001.
- Density Functional Theory: A Practical Introduction. D. Sholl. John Wiley & Sons Inc. 2009
- Molecular Modeling. A. Leach. Pearson Education Limited. 2001

