## FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES U.B.A

2 Fis

1		DEPARTAM INTO: FISICA
2		CARRERA de: a) Licenciatura en ORIENTACION
		b) Doctorado y/o Post-Grado en Doctorado
		c) Profesorado en
		d) Cursos Técnicos en Meteorología
		e) Cursos de Idiomas
3	•	ler. CUATRIMESTRE/2do. CUATRIMESTRE Año:ler. cuatrimestre 2003
		N° DE CODIGO DE CARRERA:
5		MATERIA, FISICA COMPUTACIONAL- SOLIDOS Nº DE CODIGO
6		PUNTAJE PROPUESTO: 5(cinco) puntos
		PLAN DE ESTUDIO; 1987
		CARACTER DE LA MATERIA: Optativo
		DURACION: Cuatrimestral
10		HORAS DE CLASES SEMANAL: 8 (ocho) hs
		a) Teóricas4hs. d) Seminarioshs. b) Problemashs. e) Teórico-problemashs. c) Laboratorio-Computación 4 hs. f) Teórico-prácticashs. g) Totales Horas:8hs.
11		CARGA HORARIA TOTAL: 128
		ASIGNATURAS CORRELATIVAS:
13		FORMA DE EVALUACION: Trabajos Prácticos y monografía con simulación numérica
14		PROGRAMA ANALITICO: (Se adjunta)
15		EIBLIOGRAFIA: (Se adjunta)

 $\{1,\dots,k-1,\frac{1}{2}\}_{1,\dots,k}$ 

FIRMA PROFESOR:

ACLARACION FIRMA: Dr. Marcelo Rozenberg

FECHA: 07-4-03

FIRMA DIRECTOR:

DI, FRANCISCO DIEGO MAZZITELU BIRECTOR ADJUNTO DEPARTAMENTO DE FISICA

## Física Computacional - Sólidos

Objetivo: El objetivo de este curso será el de brindar una introducción al área de las simulaciones numéricas en la física de los sistemas de materia condensada.

Utilizando técnicas de simulación numérica como el método de Monte Carlo, exploraremos el comportamiento de sistemas magnéticos y de electrones entre otros.

Algunos puntos salientes de este curso serán la utilización del laboratorio de computación para realizar simulaciones numéricas y una introducción a la programación paralela utilizando el lenguaje MPI.

## Programa:

- Introducción al Curso. Objetivos de Física Computacional. Estado del área.
- Método de Monte Carlo. Idea Básica, método de Metrópolis Aplicaciones simples.
- Análisis de errores. Bloques. Correlaciones. Modelo de Ising y de gases.
- Métodos avanzados. Probabilidades a priori. Cluster Monte Carlo.
- Dinámica molecular. Idea básica y algoritmos Aplicaciones simples.
- Estructura cristalina. Dinámica de redes.
- Dinámica de electrones. Superficies de Fermi.
- Ferromagnetos y antiferromagnetos.
- Métodos de Estructura electrónica: ligaduras fuertes, ab initio y modelos continuos.
   Bandas de energía
- Sistemas desordenados. Vidrios de Spin, clásicos y cuanticos. Método de Diagonalización Exacta.
- Introducción al computo paralelo
- · Programación paralela. MPI
- Programación paralela. MPI

Frecuencia: Dos clases por semana, de 2 horas c/u + 2 clases practicas por semana que consistirán en un espacio para realizar simulaciones, consultas y discusión.

Nota: El bloque de Programación paralela y lenguaje MPI será autocontenido y esta abierto para todos los alumnos interesados, tanto de la carrera de física como de computación científica.

## Bibliografia:

- Introduction to Monte Carlo Algorithms. W. Krauth
- Simulations for Solid State Physics. R. Silsbee y J. Drager
- Solid State Physics. Ashcroft y Mermin
- Parallel Programing with MPI. Pacheco
- Writing Message-Passing Parallel Programs with MPI. N. MacDonald y otros.

Aprobación: Presentación de trabajos prácticos (simulaciones) y un trabajo final especial con monografía y exposición oral.

DE Ay