

95QI
②

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

DEPARTAMENTO: QUIMICA INORGANICA, ANALITICA Y QUIMICA FISICA

CARRERA: Doctorado en Ciencias Químicas

ORIENTACION: ---

1er. CUATRIMESTRE: AÑO 1995

CODIGO DE CARRERA: 51

MATERIA: **Métodos de Simulación Computacional en Química**

CODIGO: materia nuev2

PUNTAJE: se propone 5 puntos.

PLAN DE ESTUDIO: ----

CARACTER DE LA MATERIA: ----

DURACION: cuatrimestral

HORAS DE CLASE SEMANAL:

* Teórico-Práctico: 6 hs

TOTAL: 6hs.

CARGA HORARIA TOTAL: 96

ASIGNATURAS CORRELATIVAS: Mínimo conocimiento de programación.

FORMA DE EVALUACION: Presentación de trabajos prácticos de confección de programas tipo.
Promoción por examen final. Sin parciales.

PROGRAMA ANALITICO:

- 1) Diseño de potenciales. Concepto de potencial intra e intermolecular. Parametrizaciones analíticas. Potenciales efectivos. Interacciones de tipo electrostático. Cálculo de cargas parciales. Expansiones en multipolos. Influencias de las fluctuaciones en la densidad electrónica molecular: efecto de la polarización.
- 2) Utilización de métodos ab-initio para la optimización de potenciales. Diseño de potenciales para sistemas inorgánicos. Mecánica molecular: diferentes parametrizaciones. Cálculo de geometrías y modos normales usando campos de fuerzas clásicos. Comparación con resultados obtenidos mediante métodos cuánticos. Estudio de sistemas típicos: agua (sólidos, líquido y vapor), macromoléculas (DNA y proteínas).
- 3) Técnicas de dinámica molecular. Algoritmos de integración. Algoritmo de Verlet en posiciones y velocidades. Algoritmo "leap frog". Simulación de distintos ensambles termodinámicos: microcanónico, canónico, presión constante. Simulación en sistemas confinados ("clusters"). Simulación en fases condensadas. Implementación de condiciones periódicas de contorno. Tratamiento de fuerzas de largo alcance: sumas de Ewald y campo reactivo.

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES	
ENTRO	SALIO
23 OCT 1995	

Dr. ENRIQUE A. SAN ROMAN
Director
Depto. QCA. INORG. ANAL. QCA, FIS.

4999 - 91A9F

APROBADO POR RESOLUCION CD 1566/95

..//

4) Aplicaciones de Dinámica Molecular en sistemas poliatómicos. Moléculas flexibles. Tratamiento de procesos con escalas de tiempo dispares. Dinámica de moléculas rígidas: vínculos. Dinámica vinculada. Aplicaciones a procesos activados en solución, reacciones químicas, simulación de reacciones rédox. Simulación de propiedades de transporte: viscosidad, conductividades eléctrica y térmica.

5) Técnicas de Monte Carlo. Proceso de Makov. Algoritmo de Metrópolis. Aplicaciones a modelos simples: el modelo de Ising. Transiciones de fase. Distribuciones no Boltzmanianas. Cálculo de energías libres. Método de Widom. Ensamble de Gibbs. Aplicaciones a cálculo de equilibrios de fases en solución.

6) Simulación de procesos dependientes del tiempo. Funciones de correlación temporal. Teoría de la respuesta lineal. Relajación dieléctrica. Propiedades espectroscópicas de sondas moleculares en solución.

BIBLIOGRAFIA:

- Computer Simulations of Liquids; M.P.Allen y D.J.Tildesley; Clarendon Press, Oxford 1986.
- Introduction to Modern Statistical Mechanics; D.Chandler; North Holland 1987.
- Computer Simulations of Statistical Mechanics Systems; G.Ciccotti y W.G.Hoover (Editores); Proceedings of an Enrico Fermi Summer School, Varenna 1987.
- Simulations of Liquids and Solids; G.Ciccotti, D.Frenkel y I.R.McDonald; North Holland 1990.

Dr. D. Laría

Dr. ENRIQUE A. SAN ROMAN
Director
Depto. QCA. INORG. ANAL. QCA, FIS.