



FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES
UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física

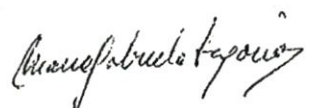
Ciudad Autónoma de Buenos Aires, 11 de abril 2016

Señor Secretario/a Académico/a
de la Facultad de Ciencias
Exactas y Naturales
S/D

Tengo el agrado de dirigirme al señor Secretario Académico a efectos de comunicarle el desarrollo del curso de post-grado y/o doctorado que se dictará en este Departamento durante el ..invierno..... de 2016.

- 1- Denominación del Curso: **ESCUELA DE SIMULACIÓN COMPUTACIONAL DE MATERIALES**
- 1a- Carácter del Curso: ampliar conocimientos
(para Doctorado: ampliar conocimientos, actualización, extensión profesional)
- 2- Fecha de iniciación: 04/07/16 al 16/07/16
- 3- A dictarse en: **Depto. de Qca. Inorgánica, Analítica y Qca. Física**
- 4- Responsable (s): Dr. Damián Scherlis Perel, Dr. Dario Estrín, Dr. Marcelo Martí y Dr. Adrián Turjansky
(si no revistan en la Facultad, adjuntar nota solicitando la autorización pertinente, la que comprenderá el dictado del Curso y la firma de las Actas de Examen pertinentes).
(Además agregar curriculum vitae resumido, debidamente firmado por el Director de Departamento o por el interesado).
- 5- Cantidad de horas semanales: 80hs semanales
- 5a- Nro. de horas semanales de clases teóricas: 50hs.totales
- 5b- Nro. de horas semanales de clases de problemas: ---
- 5c- Nro. de horas semanales de trabajos prácticos: 30hs. totales
- 6- Condiciones de ingreso: Ser egresado de carreras de química, bioquímica, física, computación.
- 7- Nro. de alumnos (mínimo y máximo): 5-20
- 8- Forma de evaluación: Tener un 80% de asistencia al curso y aprobación de examen final con calificación superior a 6.
- 8a- Certificado de aprobación: SI-NO-(tachar lo que no corresponda) Certificado de asistencia al curso (con 80% de asistencia) y/o Certificado de aprobación.
- 9- Puntaje propuesto de acuerdo con el carácter del curso: 3 (tres)
- 10- Nro. de código: nuevo
- 11- Se acompaña despacho de la Sub-Comisión Departamental con Vº.Bº. del Director de Departamento.
- 12- Se propone un arancel de ...2500.....módulos, teniendo en cuenta como base el valor de \$(el que rija en ese momento).


D. SCHERLIS


Dra. M. GABRIELA LAGORIO
SECRETARIA ACADEMICA
DEPTO. QUIMICA INORGANICA
ANALITICA y QUIMICA FISICA

COMISION DE DOCTORADO



FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES
UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física

CARRERA: Posgrado / Doctorado

CUATRIMESTRE: INVIERNO

AÑO: 2016

MATERIA: ESCUELA DE SIMULACION COMPUTACIONAL DE MATERIALES

MOLECULAS

CODIGO: nuevo

PUNTAJE: 3 (tres)

DURACIÓN: intensivo (dos semanas)

HORAS DE CLASE SEMANAL:

- Teóricas: 25hs.
- Prácticas: 15hs.

TOTAL: 40 hs.

CARGA HORARIA TOTAL: 80 hs.

CONDICIONES DE INGRESO: Ser egresado de carreras de química, bioquímica, física, computación, Ingeniería y materiales.

FORMA DE EVALUACIÓN: Tener un 80% de asistencia al curso y aprobación de examen final con calificación superior a 6.

PROGRAMA ANALÍTICO:

Objetivos: Proveer a alumnos de Doctorado en las áreas de Bioquímica, Química Biología, Física, Computación, Biotecnología y afines de los conceptos teóricos y herramientas necesarias para utilizar los métodos de Simulación Computacional en el desarrollo de sus temas de investigación relacionados. El curso está orientado tanto a estudiantes que trabajen en estas áreas, como a estudiantes que emplean herramientas experimentales, pero que deben familiarizarse con la bioinformática estructural como herramienta accesoria. El curso será dictado por los responsables de la propuesta y por los docentes invitados Xavier Barril, de la (Universidad de Barcelona), Leandro Martinez, de (UNICAMP-Brasil), Valeria Molinero (Universidad de Utah-USA) y Pablo Dans-Puigross (Institute for Research in Biomedicine).

En cuanto a infraestructura se empleará un laboratorio de 30 estaciones de trabajo,

Maria Gabriela Lagorio
Dra. M. GABRIELA LAGORIO
SECRETARIA ACADEMICA
DEPTO. QUIMICA INORGANICA
ANALITICA y QUIMICA FISICA



FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física

disponible en el Departamento de Computación de la FCEN y recursos de cómputo del CECAR (Centro de Computación de Alto Rendimiento) de la FCEN.

Programa:

- 1) Concepto de simulación computacional en Ciencia: relación entre experimento, teoría y simulación. Simulación computacional en Química y Bioquímica. 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. Campos de fuerzas para agua. Modelos de campo medio. 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. Condiciones periódicas de contorno (PBC) y sumas de Ewald. 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: Métodos Híbridos Cuántico-Clásicos. 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).

Gabriela Lagorio
Dra. M. GABRIELA LAGORIO
SECRETARIA ACADEMICA
DEPTO. QUIMICA INORGANICA
ANALITICA Y QUIMICA FISICA



FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES
UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física

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. Dinámica Molecular de Car-Parrinello.

8) Dinámica cuántica y transporte electrónico en materiales y en nanoestructuras. Cálculo de la conductancia cuántica a través de funciones de Green de no equilibrio, y formalismo de Landauer-Buttiker. Evolución en tiempo real por medio de la teoría del funcional de la densidad dependiente del tiempo (RT-TDDFT).

9) 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.

Modalidad de los Trabajos Prácticos:

Los trabajos prácticos consistirán en el 50% del tiempo del curso. En los mismos el alumno aprenderá en una primera etapa a utilizar las herramientas básicas genéricas para la realización de a) simulaciones cuánticas o ab-initio (utilizando los programas programa Gaussian, SIESTA, y Lio b) Simulaciones Clásicas (Biomoléculas y clusters) utilizando el programa Amber. c) Desarrollo y la obtención de parámetros específicos para un sistema de interés. d) la predicción de propiedades estructurales y reactividad mediante cálculos de energía libre utilizando diferentes esquemas de muestreo.

Primera semana

- TP1 – Estructura electrónica de sistemas pequeños*
- TP2 – Bases de dinámica molecular clásica*
- TP3 – Dinámica molecular avanzada, métodos de análisis, modos normales.*
- TP4 – Simulaciones de Monte Carlo - Packmol*
- TP5 - Parametrización de potenciales atomísticos*

Segunda semana

- TP6 – Estructura electrónica de sistemas extendidos*
- TP7 – Método de Car-Parrinello*
- TP8 – Métodos híbridos QM – MM -*
- TP9 - Transporte cuántico*

Bibliografía:

- 1) Understanding molecular simulation; from algorithms to applications, Dan Frenkel, Berend Smit, AP, 2001.
- 2) Molecular Modeling, principles and applications, A. Leach, Pearson, 2001.
- 3) The art of molecular dynamics simulation, D. Rapaport, 2nd edition, Cambridge

Maria Gabriela Lagorio
Dra. M. GABRIELA LAGORIO
SECRETARIA ACADEMICA
DEPTO. QUIMICA INORGANICA
ANALITICA y QUIMICA FISICA



FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES
UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física

Press, 2004.

- 4) Quantum Chemistry, 7th edition, I.N. Levine, 2013.
- 5) Computational Materials Sciences: surfaces, interfaces, crystallization, A.M Ovrutsky, A.S. Prokhoda, M.S. Rasschupkyna, Elsevier, 2014.

Dra. M. GABRIELA LAGORIO
SECRETARIA ACADEMICA
DEPTO. QUIMICA INORGANICA
ANALITICA y QUIMICA FISICA