

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. Ensamblés. 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).
- 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.
- 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, 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 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.

10) Implementaciones computacionales. Uso de implementaciones paralelas. Uso de CPUs y placas gráficas (GPUs).

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 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.

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 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.

TP1	Estructura electrónica de sistemas pequeños.
TP2	Dinámica molecular clásica – Básico.
TP3	Dinámica molecular clásica – Avanzado.
TP4	Simulaciones de Monte Carlo - Packmol
TP5	Parametrización de potenciales atomísticos.
TP6	Estructura electrónica de sistemas extendidos
TP7	Método de Car-Parrinello
TP8	Métodos híbridos QM-MM -
TP9	Transporte cuántico

Objetivos: Proveer a alumnos de Doctorado en las áreas de Ingenierías, Química y Ciencias de Materiales, 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 las técnicas de simulación como herramienta accesoria.

Carga Horaria: 80 horas

Evaluación: La nota final se obtiene mediante un examen final domiciliario, un seminario de artículo de investigación en la última clase, y el desempeño en los trabajos prácticos.