



UNIVERSIDAD SIMÓN BOLÍVAR
Vicerrectorado Académico

1. Departamento: *FISICA*

2. Asignatura: TECNICAS PARA EL MODELAJE COMPUTACIONAL EN NANOCIENCIAS

3. Código de la asignatura: FS-5868

No. de unidades-crédito: 3

No. de horas semanales: Teoría 4

4. Fecha de entrada en vigencia de este programa: SEPTIEMBRE-DICIEMBRE 2012

5. Requisitos: (*códigos*)

Para la Lic. de Física: Física Computacional (FS-5221), Física Moderna 2 (FS-3412) y Permiso de Coordinación

Para la Lic. De Química: Físico-Química III (QM 2513)

6. OBJETIVO GENERAL:

Proporcionar a los estudiantes competencias para la simulación computacional de nanosistemas.

7.) OBJETIVOS ESPECÍFICOS:

Proporcionar a los estudiantes competencias para:

El modelaje computacional de los materiales nanoestructurados y sus propiedades

El modelaje computacional de los procesos físico-químicos (catálisis, adsorción, auto-organización, separación de fase)

Proporcionar al estudiante conocimientos sobre:

Las técnicas de campos de fuerzas para la simulación computacional de la nanoescala

Las técnicas para la simulación de la estructura electrónica de los nanosistemas

Los métodos computacionales disponibles en la literatura, sus aplicaciones y limitaciones

8. CONTENIDOS

Modulo I: Introducción a las técnicas de simulación computacional en nanociencia

Introducción (porqué la simulaciones en nanociencia)

Modelaje de las interacciones inter e intra-moleculares

La aproximación atomística

Los modelos coarse-grained

Los modelos campos de fuerza (force fields)

Los modelos semiempíricos y de primeros principios

Herramientas para la simulación computacional

La aproximación estocástica (la técnica de Monte Carlo)

La aproximación determinística (la técnica de Dinámica Molecular)

Modulo II: Introducción a la simulación de la estructura electrónica de los nanomateriales

A. Nociones de los métodos de cálculo de la estructura electrónica y la filosofía computacional

- El principio variacional y el problema de muchos cuerpos.
 - La teoría de Hartree-Fock y el conjunto de bases.
 - La simulación de sistemas periódicos
- ### 2. Introducción a la Teoría Funcional de la Densidad (DFT)
- Algunos códigos computacionales DFT
 - Aplicación de DFT a las nanopartículas de metales de transición
- ### 3. Las aproximaciones semiempíricas (el caso tight-binding):
- La aproximación de enlaces fuertes (tight-binding)
 - La técnica Density Functional Tight Binding (DFTB).
 - Las técnicas de parametrización
 - Aplicación a los de nanotubos de carbono
- ### 4. Aplicación de técnicas para la minimización de energía en nanosistemas cuánticos
- Dinámica molecular y Monte Carlo.
 - El método de dinámica molecular Car-Parinello.
 - Técnicas para la búsqueda de los mínimos globales de las nanopartículas
- ### 5. Las fuerzas débiles.
- Los desafíos en la descripción de los enlaces de hidrógenos y las interacciones de Van der Waals.
 - Aplicaciones de DFT a las interacciones de las biomoléculas

9. ESTRATEGIAS METODOLÓGICAS, DIDACTICAS O DE DESARROLLO DE LA ASIGNATURA:

1. *Clases magistrales*
2. *Trabajos en grupo*
3. *Sesiones de Ejercicios y/o Problemas*
4. *Simulaciones computarizadas*

10. ESTRATEGIAS DE EVALUACIÓN:

1 examen escrito y trabajos asignados a los estudiantes

11. FUENTES DE INFORMACIÓN:

H.Gould, J.Tobochnik and W.Christian, "An introduction to computer simulation methods: applications to physical systems".

D.Frenkel and B.Smit, "Understanding molecular simulations, Second Edition : From algorithms to applications"

M. P. Allen and D. J. Tildesley, "Computer simulation of liquids"

Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory-Attila Szabo and Neil S. Oslund

Density-Functional Theory of Atoms and Molecules-Robert G. Parr and Weitao Yang

Elementary electronic structure - Walter A. Harrison

Physical Properties of Carbon Nanotubes-Richihiro Saito, Gene Dresselhaus, Mildred S. Dresselhaus