



Universidad Nacional de Santiago del Estero

Facultad de Ciencias Exactas y Tecnologías



HONORABLE CONSEJO DIRECTIVO, 30 de Noviembre de 2021

RESOLUCIÓN N° 96/2021

V I S T O:

El CUDAP:TRAMITE_FCEYT-MGE: 0001203/2021, iniciado por la Dra. Ana Estela LEDESMA; y

CONSIDERANDO:

Que mediante el mismo solicita Auspicio Institucional para la realización del curso de postgrado “MÉTODOS COMPUTACIONALES PARA EL ESTUDIO DE ESTRUCTURAS MOLECULARES Y ATOMICAS”, a dictarse en el Marco de la Carrera de Doctorado en Ciencia y Tecnología de la UNSE.

Que el mismo se dictará en la Facultad de Ciencias Exactas y Tecnologías de la UNSE, en la modalidad virtual del 25 al 29 de Abril de 2022, por Docentes de la FCEyT y con docentes invitados de la Universidad Nacional de San Luis.

Que este curso tiene como finalidad “adquirir conocimientos de la Mecánica cuántica y mecánica estadística, y sus aplicaciones para una mejor interpretación de las propiedades estructurales, magnéticas y eléctricas” y estará dirigido a “Licenciados e Ingenieros interesados en la aplicación de modelos teóricos para la elucidación de estructuras moleculares de sistemas sólidos y aislados”. Se adjunta planilla de curso de posgrado.

Que el Honorable Consejo Directivo en reunión Ordinaria N° 11/2021, de fecha 20 de Septiembre de 2021, trató y aprobó cursar las presentes actuaciones a la Comisión de Ciencia Técnica y Vinculación Tecnológica.

Que el Honorable Consejo Directivo en reunión ordinaria virtual de fecha 29 de Noviembre de 2021, trató y aprobó por unanimidad el despacho de la Comisión de Ciencia, Técnica y Vinculación Tecnológica que expresa: “*se brinde Auspicio Institucional de acuerdo a la Resolución Consejo Superior N° 298/2018, al curso “MÉTODOS COMPUTACIONALES PARA EL ESTUDIO DE ESTRUCTURAS MOLECULARES Y ATOMICAS”, que se dictará en la Facultad de Ciencias Exactas y Tecnologías de la UNSE, en la modalidad virtual desde el 25 al 29 de Abril de 2022”*”.

Por ello:



Universidad Nacional de Santiago del Estero

Facultad de Ciencias Exactas y Tecnologías



HONORABLE CONSEJO DIRECTIVO, 30 de Noviembre de 2021

RESOLUCIÓN N° 96/2021

**EL HONORABLE CONSEJO DIRECTIVO DE LA
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y TECNOLOGÍAS;**

RESUELVE:

ARTÍCULO PRIMERO. –Otorgar el Auspicio Institucional al el curso “MÉTODOS COMPUTACIONALES PARA EL ESTUDIO DE ESTRUCTURAS MOLECULARES Y ATOMICAS”, a desarrollarse en la Facultad de Ciencias Exactas y Tecnologías de la UNSE, en la modalidad virtual desde el 25 al 29 de Abril de 2022, en un todo de acuerdo al ANEXO de la presente Resolución.

ARTICULO SEGUNDO. - Dar a conocer por los medios comunes de la Facultad. Notifíquese a la **Dra. Ana LEDESMA**. Cumplido, archívese.


Dra. María Fernanda Mellano
SECRETARIA ACADEMICA
Fac. de Cs. Exactas y Tecnologías




Ing. Pedro Juvenal Basualdo
DECANO
Fac. de Cs. Exactas y Tecnologías
UNSE



HONORABLE CONSEJO DIRECTIVO, 30 de Noviembre de 2021

RESOLUCIÓN N° 96/2021

ANEXO

Año: 2021	Nombre del Curso: <i>MÉTODOS COMPUTACIONALES PARA EL ESTUDIO DE ESTRUCTURAS MOLECULARES Y ATOMICAS</i>
Fechas del curso: 25 al 29 de Abril de 2022	
Formato (Curso teórico; Curso Teórico Práctico; Taller; Seminario; etc.): teórico - práctico	
Modalidad (presencial, virtual, combinado): virtual	
Cantidad de Hs Presenciales Cantidad de Hs virtuales: 60 (20 hs de asesoría en resolución de actividades prácticas)	
Aranceles: \$ 4.000 publico general. Estudiantes de posgrado \$ 3.000. Estudiantes del Doctorado en Ciencias y Tecnologías (UNSE): \$ 2.500	
Cupo Mínimo: 6 Cupo Máximo: 15	
Fines y objetivos que desea alcanzar: El curso está dirigido a Licenciados e ingenieros interesados en la aplicación de modelos teóricos para la elucidación de estructuras moleculares de sistemas sólidos, aislados y en solución. Tiene por finalidad adquirir conocimientos sobre las técnicas de cálculo y simulación de la Mecánica cuántica y mecánica estadística, y sus aplicaciones para una mejor interpretación de las propiedades estructurales, magnéticas y eléctricas.	
Contenidos Mínimos Introducción a la Química teorica. Hardware y software. Parametros computables. Algoritmos. Introduccion a la Mecánica Cuántica. Metodos de la mecanica cuantica. Metodos de Estructura Electronica. Método de Monte Carlo: Estimadores. Proceso de Markov. Ergodicidad. Balance detallado. Modelo de Ising y algoritmo de Metrópolis. Técnicas de muestreo simple: ejemplos de aplicación.	
Programa Analítico del Curso TEMA I. INTRODUCCIÓN Definiciones. Mecánica Cuántica y mecánica estadística. Parámetros computables: Estructura. Superficies de energía potencial. Hardware y Software. Algoritmos. Unidades. Fundamentos principales. Formas funcionales de la energía potencial: Estiramiento de enlaces. Deformaciones angulares. Ángulos de torsión. Interacciones de tipo Van der Waals. Interacciones de tipo electrostáticas. Términos cruzados.	



HONORABLE CONSEJO DIRECTIVO, 30 de Noviembre de 2021

RESOLUCIÓN N° 96/2021

TEMA II MÉTODOS DE ESTRUCTURA ELECTRONICA

Ecuación de Schrödinger. Aproximación de Born – Oppenheimer Teoría de orbitales moleculares. Aproximaciones de Hartree y CLOA. Funciones de base: Formas de funciones. Correlación electrónica dinámica y no dinámica. Ejemplos de aplicación al estudio estructural y vibracional

TEMA III INTRODUCCION AL METODO DE MONTECARLO

Introducción. Alcances del método. Simulación y experimento. Breve introducción histórica. Termodinámica y mecánica estadística: revisión. Estimadores. Proceso de Markov. Ergodicidad. Balance detallado. Modelo de Ising y algoritmo de Metrópolis. Modelos de gas de red. Técnicas de muestreo simple: ejemplos de aplicación.

APLICACIONES: El problema de percolación y sus aplicaciones.

TEMA IV MODELOS E IMPLETACION DEL METODO DE MONTECARLO

Implementación de algoritmos. Generadores de números aleatorios. Algoritmo de Glauber y de Kawasaki. Condiciones de contorno. La condición de equilibrio. Modelo de Ising en dos dimensiones. Adsorción de especies atómicas con interacciones laterales. Cálculo de cantidades termodinámicas. Algoritmo N foldway. Propagación de epidemias Aplicaciones.

APLICACIÓN: Fenómeno de adsorción atómica. Monte Carlo dinámico.

Distribución Horaria: Lunes a viernes de 9-13 Hs y de 15-18 hs

Metodología:

Clases sincrónicas por video conferencia via Cisco Webex Meeting, en los horarios indicados. Trabajo domiciliario de estudiantes en la elaboración de prácticos

Sistema de Evaluación:

Se evaluará por el envío de un examen via email, que los estudiantes deberán responder y enviar por email en un plazo de 5 horas.

Lugar y Fecha de Realización: FCEyT-UNSE, 25 al 29 de Abril de 2022

Conocimientos previos necesarios: no corresponde

Profesionales a los que está dirigido el curso: Lic. en química, Física, Biotecnología, Ingenieros eléctricos, electrónicos, electromecánicos y carreras afines

Director Responsable del curso:

Dra. Ana E. Ledesma

(Debe intervenir en el dictado activo del curso. Debe presentar la solicitud de autorización de dictado completando en forma concisa la presente planilla. Debe poseer antecedentes que garanticen un nivel adecuado de conocimientos en todos los temas del curso).



HONORABLE CONSEJO DIRECTIVO, 30 de Noviembre de 2021

RESOLUCIÓN N° 96/2021

Cuerpo Docente:

Docentes:

Dra. Ledesma, Ana Estela (Inv. Adjunto CIBAAL-UNSE-CONICET, Prof. Asociado FCEyT-UNSE)

Dr. Pinto, Oscar Alejandro (Inv. Adjunto INBIONATEC-UNSE-CONICET, Prof. Adjunto FCEyT-UNSE)

Docentes invitados:

Dr. Centes, Paulo Marcelo (Inv. Adjunto INFAP- CONICET, Prof. Adjunto (FCFMyN - UNSL)

Dr. Pasinetti, Pedro Marcelo (Inv. Adjunto INFAP-CONICET, Prof. Adjunto (FCFMyN - UNSL)

Colaborador: Lic. Pablo Argañaraz (CPA CIBAAL-UNSE-CONICET)

Coordinador: Dr. Oscar A. Pinto

Bibliografía: 1- I. Levine, "Quantum Chemistry", 5ta Edición, Allyn and Bacon, Boston, 2001.

2- C. J. Cramer, "Essentials of Computational Chemistry- Theories and Models". 1ra Edición. John Wiley&Sons, LTD. 2002.

3- J. Bertrán Rusca y J. Núñez Delgado. "Química Física" Vol.I. 1ra Edición, 2002.

4- J. B. Foresman, E. Frisch, "Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods". 2da edición, 1996.

5- P. Gans, "Vibrating Molecules" Chapman and Hall LTD, 1ra Edición, 1971.

6- M. E. J. Newman y G.T. Barkema, "Monte Carlo Methods in Statistical Physics", Oxford university press, (2002).

7- K. Binder y D.W. Heermann, "Monte Carlo Simulation in Statistical Physics, An introduction", Springer-Verlang (1992).

8- D.P. Landau y K. Binder, "A guide to Monte Carlo simulation in statistical physics" Cambridge University Press, New York (2005)

9- D. Nicholson, N. G Parsonage, "Computer Simulation and Statistical Mechanics of Adsorption", Academic Press, London, (1982).

Dra. María Fernanda Mellano
SECRETARIA ACADÉMICA
Fac. de Cs. Exactas y Tecnologías



Ing. Pedro Juvenal Basualdo
DECANO
Fac. de Cs. Exactas y Tecnologías
UNSE