

Especialidad: Materia Condensada

<p>Nombre del curso</p>	<p>TÓPICOS ESPECIALES EN FÍSICA DE MATERIA CONDENSADA I y II MÉTODOS COMPUTACIONALES PARA PROBLEMAS APLICADOS Código USM: FIS495/FIS496 Código PUCV: FIS874/FIS875</p>
<p>Descripción del curso</p>	<p>Este curso presenta teoría y aplicación de métodos de simulación computacional para átomos y partículas con el objetivo de: modelar, entender y predecir propiedades multiescala de materiales reales (gases, líquidos y sólidos). Se incluye:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Modelos de energía derivados desde primeros principios a potenciales clásicos y de muchos cuerpos; 2. Simulaciones Montecarlo y de dinámica molecular; 3. Colectividad termodinámica, energía libre y transiciones de fase; 4. Tratamiento de fuerzas de largo alcance; 5. Fluctuaciones y cálculo de propiedades de transporte; 6. Aproximaciones de multiescala y modelos mesoscópicos; 7. Hidrodinámica de partículas; 8. Dinámica de partículas disipativas. <p>Este curso emplea casos de estudio desde aplicaciones industriales de materiales avanzados hasta la nanotecnología. Varios laboratorios computacionales darán a los estudiantes experiencia directa con simulaciones en paquetes LAMMPS de campos de fuerza y dinámica molecular.</p>
	<p>Asignatura de Tópicos Especiales – Materia Condensada PREREQUISITOS: Mecánica Estadística, conocimientos básicos de lenguaje de programación C o derivados Créditos USM: 5 Créditos PUCV: 7 Horas Semanales Cátedra: 4 Horas Semanales Ayudantía: - Horas Semanales Laboratorio: -</p>
<p>Objetivos</p>	<p>El objetivo de este curso especial es profundizar el conocimiento de los estudiantes de postgrado en el área de materia condensada, con especial énfasis en los métodos computacionales para modelar, entender y predecir</p>

	<p>propiedades multiescala de materiales reales (gases, líquidos y sólidos).</p>
<p>Contenidos</p>	<p>Unidad 1: Modelos de energía</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Construyendo funciones de potencial; 2. Modelos de interacción para diferentes aplicaciones; 3. Interacciones interatómicas y diferentes formas de crear enlaces; 4. Potenciales moleculares; 5. Modelos para metales, covalentes y materiales basados en carbón; 6. Efectos de “muchos cuerpos” en potenciales empíricos; 7. Trucos de modelamiento; calculando fuerzas e implicaciones del acortamiento de la duración de interacción. <p>Unidad 2. Simulaciones Monte Carlo</p> <ol style="list-style-type: none"> 8. Integración Monte Carlo; 9. Muestreo preferencial; 10. Método de Metrópolis; 11. Métodos de Monte Carlo isotérmicos, isobáricos y macro canónica; 12. Trucos de simulación: condiciones de frontera periódicas, manejo de fuerzas de largo alcance y listas de vecinos. <p>Unidad 3. Simulaciones en dinámica molecular</p> <ol style="list-style-type: none"> 13. Ecuaciones de movimiento y su integración; 14. Colectividad NVE, NVT, y NPT; 15. Fluctuaciones y cálculo de propiedades de transporte; 16. Restricciones dinámicas; 17. Minimización de energía; 18. Mecánica molecular. <p>Unidad 4: Métodos mesoescala y mesoscópicos</p> <ol style="list-style-type: none"> 19. Ejemplos de polímeros; 20. Desde potenciales empíricos de muchos cuerpos a hidrodinámica suave de partículas; 21. Dinámica de partículas disipativa. <p>Unidad 5: Aplicaciones</p> <ol style="list-style-type: none"> 22. Reacciones químicas; 23. Sistemas tribológicos y líquidos iónicos;

	<p>24. Manipulación de nanoobjetos con fuerza atómica lateral;</p> <p>25. Nanopartículas magnéticas</p>
Modalidad de evaluación	<p>Habrán tres formas de evaluación, cada una con un peso relativo en el notal final del curso.</p> <p>Informes Parciales (20%): Al final de cada unidad los estudiantes enviarán electrónicamente un informe de sus progresos parciales en el laboratorio y un informe de la unidad.</p> <p>Trabajo de campo (60%): Se evaluarán los progresos de cada estudiante en el desarrollo de la simulación correspondiente a cada unidad didáctica.</p> <p>Presentación final (20%): Al final del curso los estudiantes presentarán un informe y harán una presentación oral de las prácticas desarrolladas.</p>
Bibliografía	<p>Básica: “Computer Simulations of Liquids”, M.P.Allen, D.J. Tildesley; LAMMPS manual http://lammeps.sandia.gov/doc/Manual.html</p> <p>Recomendada:</p> <ul style="list-style-type: none"> ▪ “A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics”, D. P. Landau, Kurt Binder; ▪ “Understanding molecular simulation: from algorithms to applications”, D. Frenkel, B. Smit; ▪ “Numerical Simulations in Molecular Dynamics” M. Griebel, S. Knapek, G. Zumbusch.