

Universidad de La Habana
Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales

Curso de Postgrado Simulación Computacional de Materiales	Total de Horas: 96 Créditos: 2	Tipo de curso: Fundamental _ Específico <u>x</u> Carácter: Obligatoria _ Opcional <u>x</u>
Profesor Dra. Anabel Lam Barandela		
Objetivo general <ul style="list-style-type: none"> Formar al profesional en aspectos básicos relacionados con la simulación computacional de materiales. 		
Contenidos (temas) <ul style="list-style-type: none"> Introducción a los métodos de simulación computacional de materiales: Clasificación, potencialidades, aplicaciones y limitaciones. Técnicas de simulación a la Nano y Micro escala: <ul style="list-style-type: none"> Potenciales de interacción más usados en los métodos clásicos de simulación: funciones analíticas, métodos de parametrización. Método de minimización de energía: métodos numéricos de búsqueda de mínimos, aplicación al estudio de estructura de sólidos cristalinos. Método de Monte Carlo: Principios de mecánica estadística. El método de Metrópolis. Aplicaciones del Método de MONTE Carlo en Ciencia de Materiales. Método de Dinámica Molecular: ecuaciones de movimiento. Integración de las ecuaciones de movimiento. Condiciones de frontera periódica. Manejo de las interacciones de largo alcance: Sumas de Ewald. Aplicaciones en la Ciencia de Materiales. Métodos de la mesoescala más utilizados. <ul style="list-style-type: none"> Monte Carlo cinético: Introducción y fundamentación. Influencia del tamaño del enrejado y la simetría. Aplicaciones en la Ciencia de Materiales. Dinámica Disipativa de Partículas: Descripción de la técnica. Implementación del método. Conservación de la energía en la DPD. Aplicaciones en la Ciencia de Materiales. 		
Objetivos específicos (habilidades a adquirir por parte de los estudiantes) <ul style="list-style-type: none"> Profundizar en el conocimiento de los métodos de simulación computacional de materiales: minimización de energía, Monte Carlo, Dinámica Molecular, Monte Carlo cinético y Dinámica Disipativa de Partícula. Introducir a los estudiantes en la explotación de las diferentes técnicas empleadas de conjunto, para resolver problemas concretos de la Ciencia de Materiales. 		
Bibliografía fundamental <ul style="list-style-type: none"> Understanding Molecular Simulation. From Algorithms to Applications. Daan Frenkel and Berend Smit. Copyright 2002. Academic Press (Versión digital). Computer Simulation of Liquids. M. P. Allen and D. J. Tildesley. 1991. Oxford University Press (Versión digital). COMPUTER MODELLING OF MICROPOROUS MATERIALS . C.R.A. Catlow, R.A. Van Santen y B. Smit. 2004. Elsevier Academic Press (Versión digital). Computational Material Science. The simulation of Materials Microstructures and Properties. Dierk Raabe. Wiley-VCH, 1998. (Versión digital). Introduction to computational chemistry. Frank Jensen. Copyright 2007, John Wiley & Sons Ltd . (Versión digital). THE ART OF MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION . Second Edition . D. C. RAPAPORT. Cambridge University Press , 2004. (Versión digital). 		
Sistema de evaluación <ul style="list-style-type: none"> Seminarios Examen 		
Formas de enseñanza <ul style="list-style-type: none"> Conferencias (predomina la exposición del profesor), Seminarios (predomina la participación de los estudiantes) 		

Actualización Nov/2017 Dra. Anabel Lam.