



Universidad Nacional de Salta
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS
Av. Bolivia 5150 - 4400 - Salta
Tel. (0387)425-5408 - Fax (0387)425-5449
Republica Argentina



SALTA, 03 de junio de 2013

EXP-EXA: 8154/2013

RESCD-EXA: 270/2013

VISTO:

La presentación realizada por la Dra. Mariela Finetti, mediante la cual solicita autorización para el dictado del Curso de Posgrado “Simulación Computacional en Sistemas Extendidos”, a cargo del Dr. Damián Scherlis – docente de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales de la Universidad de Buenos Aires.

CONSIDERANDO:

Que se cuenta con despachos favorables del Departamento de Química (fs. 12), de Comisión de Hacienda (fs. 24 vta.), de la Comisión de Posgrado (fs. 26) y de Comisión de Docencia e Investigación (fs. 27).

POR ELLO y en uso de las atribuciones que le son propias.

EL CONSEJO DIRECTIVO DE LA FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS
(en su sesión ordinaria del día 22/05/13)

R E S U E L V E:

ARTICULO 1º: Autorizar, en el marco de la Res. CS-640/08, el dictado del Curso de Posgrado “**Simulación Computacional en Sistemas Extendidos**” bajo la dirección del Dr. Damián Scherlis, con las características y requisitos que se explicitan en el Anexo I de la presente.


ARTICULO 2º: Disponer que, una vez finalizado el curso, el director responsable elevará el listado de los participantes promovidos para la confección de los certificados respectivos, los que serán emitidos por esta Unidad Académica de acuerdo a lo establecido en la reglamentación vigente (Res- CS-640/08).

ARTICULO 3º: Hágase saber con copia al Dr. Damián Scherlis, a la Dra. Mariela Finetti, a la Comisión de Posgrado, a los Departamentos Docentes que integran la Facultad, a la Dirección General Administrativa Económica, al Departamento Adm. de Posgrado y publíquese en la pag. web de la Facultad. Cumplido, RESÉRVESE.

mxs


M^g. MARIA TERESA MONTERO LAROCCA
SECRETARIA ACADEMICA Y DE INVESTIGACION
FACULTAD DE CS. EXACTAS - UNSa




Ing. CARLOS EUGENIO PUGA
DECANO
FACULTAD DE CS. EXACTAS - UNSa



Universidad Nacional de Salta
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS
Av. Bolivia 5150 - 4400 - Salta
Tel. (0387)425-5408 - Fax (0387)425-5449
Republica Argentina



ANEXO I de la RESCD-EXA: 270/2013 - EXP-EXA: 8154/2013

Curso de Posgrado: “Simulación Computacional en Sistemas Extendidos”

Director del curso: Dr. Damián Scherlis (Fac. de Cs. Exactas y Naturales - UBA)

Fines y Objetivos : Proporcionar una base para el análisis de estructuras y propiedades de sólidos y superficies y de su interacción con especies moleculares empleando métodos de simulación computacional basados en la teoría del funcional de la densidad (DFT), ondas planas y pseudopotenciales. Se empleará como herramienta de cálculo el paquete de código abierto Quantum Espresso.

Conocimientos previos: Nociones básicas de mecánica cuántica y termodinámica, y de física y química de sólidos o materiales.

Metodología: Cuatro módulos diarios de 2 horas cada uno. Dos teóricos y dos prácticos en el laboratorio de computadoras.

Dirigido a: Licenciados en Química, Licenciados en Física.

Carreras de posgrado a los que está dirigido el curso: Doctorado en Ciencias.

Carga horaria: 40 horas distribuidas en una semana de clases.

Fecha de dictado: Facultad de Ciencias Exactas de la Universidad Nacional de Salta, del 08 al 12 de julio de 2013.

Evaluación: Examen escrito.

Arancel: sin arancel.

Inscripciones: Mesa de Entrada de la Facultad de Ciencias Exactas, en horario de atención al público (lunes a viernes de 10:00 a 13:00 y de 15:00 a 17:00).

Programa del curso

Parte Teórica:

Tema 1.- Introducción a la estructura atómica y electrónica de sistemas extendidos: polímeros, sólidos y superficies.

Tema 2.- Solución de la ecuación de Schrödinger en un potencial periódico: funciones de Bloch.

Tema 3.- Diagramas de bandas y nivel de Fermi. Densidad de estados.

Tema 4.- Implementación metodológica: funciones de base deslocalizadas y pseudopotenciales. Cálculo de la energía superficial, reconstrucciones, función trabajo, energía de adsorción.

Tema 5.- Dinámica molecular de primeros principios: método de Born-Oppenheimer y esquema de Car-Parrinello.

///...



Universidad Nacional de Salta

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS
Av. Bolivia 5150 - 4400 - Salta
Tel. (0387)425-5408 - Fax (0387)425-5449
Republica Argentina



.../// - 2 -

ANEXO I de la RESCD-EXA: 270/2013 - EXP-EXA: 8154/2013


Parte Práctica:

Sólidos: Cálculo de estructura, parámetro de red. Obtención de diagrama de bandas, densidad de estados, densidad de estados proyectada. Dinámica molecular.

Superficies: Reconstrucciones, evaluación de energía de adsorción y de la función trabajo.

Bibliografía

- R.M. Martin, Electronic Structure. Cambridge University Press, 2004.
- J. Kohanoff, Electronic Structure Calculations for Solids and Molecules. Cambridge University Press, 2006.
- R.G. Parr and W. Yang, Density-Functional Theory of Atoms and Molecules. Oxford University Press, 1988.
- E. Kaxiras, Atomic and electronic structure of solids. Cambridge University Press, 2003.
- D. Marx and J. Hutter, Ab Initio Molecular Dynamics: Basic Theory and Advanced Methods. Cambridge University Press, 2009


Mg. MARIA TERESA MONTERO LARocca
SECRETARIA ACADEMICA Y DE INVESTIGACION
FACULTAD DE CS. EXACTAS - UNSa




Ing. CARLOS EUGENIO PUGA
DECANO
FACULTAD DE CS. EXACTAS - UNSa