

CURSO DE POSGRADO DE FORMACIÓN ESPECÍFICA

SIMULACIONES COMPUTACIONALES EN SISTEMAS DE MATERIA CONDENSADA. Desde materiales hasta sistemas biológicos

Director: Dr. Marcelo M Mariscal

Del 2 al 13 de Diciembre

De 9 a 13 h

20 h teóricas y 20 h práctica.

PROGRAMA:

I. Objetivos (Orientar hacia quiénes va dirigido):

El presente curso de doctorado tiene como objetivo familiarizar a los alumnos con las distintas técnicas de simulación computacional para ser aplicadas a fenómenos que ocurren a nivel atomístico, donde los experimentos virtuales cobran real importancia.

La impronta del curso es dar un fuerte contenido de los fundamentos, y posteriormente aplicarlos a problemas concretos. Es deseable que los participantes posean una experiencia de programación para agilizar el desarrollo de los prácticos de computación.

II. Contenidos teóricos:

1. Breve repaso de elementos básicos de Termodinámica Estadística (Ezequiel Leiva)
 - Conjunto Estadístico.
 - Postulados de la Mecánica Estadística
 - Ensamblés
 - Conexión con la Termodinámica
 - Fluctuaciones
2. Introducción a la simulación por computadora. Tipos de modelos: cuánticos, semiempíricos, mesoscópicos, continuos. (Marcelo Mariscal)

Métodos de dinámica atómica/molecular

- Ecuaciones diferenciales ordinarias para dinámica de partículas.
 - Las bases de dinámica molecular clásica. Elementos de mecánica clásica
 - Condiciones iniciales (estructuras: nanopartículas, nanotubos, nanoalambres, distribución de momentos, etc)
 - Dinámicas no-Newtonianas
 - Formas de mejorar la eficiencia del cálculo.
 - Introducción a dinámica *ab-initio*
3. Métodos de Monte Carlo (German Soldano, Oscar Oviedo, Ezequiel Leiva)
 - Las ideas básicas del método de MC.
 - Integración por MC, promedios termodinámicos.
 - Algoritmo de Metrópolis.
 - Ensamblés (canónico, gran canónico)
 - Monte Carlo Cinético

- Formas de mejorar la eficiencia del cálculo.
4. Potenciales Interatómicos (Jimena Olmos Asar – Marcelo Mariscal)
 - Introducción, Aproximación de Born-Oppenheimer.
 - Potenciales de a pares y sus limitaciones. Relaciones con constantes elásticas.
 - Campos de fuerza para sistemas moleculares / Bioquímicos
 - Modelos para el H₂O
 - Potenciales “many-body” para metales y semiconductores
 - Campos de fuerza reactivos
 - Tratamiento de las interacciones electrostáticas (Ewald, Damped Shifted Potential)
 - Calculo de fuerza para dinámica molecular.
 - Ajuste de potenciales semiempíricos a partir de cálculos de DFT.

 5. Análisis de los experimentos *in silico* (Jimena Olmos Asar – Marcelo Mariscal)
 - Propiedades de equilibrio (energía, presión, temperatura, distribución de velocidades, fluctuaciones.)
 - Propiedades dinámicas (funciones de correlación temporal, coeficientes de transporte, etc.)

 6. Métodos de optimización global de energía (Fabio Negreiros, Luis Reinaudi)
 - A) Superficies de energía potencial.
 - Introducción – generalidades sobre las técnicas de optimización
 - Métodos deterministas
 - Gradiente conjugado
 - Método de *Quasi-Newton*
 - *Steepest descent*
 - Métodos estocásticos
 - Templado Simulado.
 - Algoritmos Genéticos.
 - Algoritmos Basin-hopping.
 - Algoritmos de enjambre.

 - B) Calculo de energías de activación (Oscar Oviedo)
 - Método de la banda elástica (NEB: Nudged Elastic Band)
 - Método del dímero para el cálculo de energías de activación
 - On-the-fly KMC.

 7. Métodos Avanzados de Muestreo (Marcos Villarreal, Alexis Paz)
 - Umbrella Sampling.
 - Integración termodinámica
 - Free energy perturbation
 - Método de Jarzynski
 - Steered Molecular Dynamics
 - Replicas Paralelas

- TAD-Dinámica Acelerada por temperatura
- Hiperdinámica
- Metadinámica
- TAMM Dinámica Molecular acelerada por temperatura

Contenidos Prácticos

Se realizarán clases prácticas en el gabinete de computación aplicando las técnicas de cálculo expuestas, en todos los casos serán tutoriales guiados por el docente.

Actividad Práctica 1: Dinámica Molecular. Familiarización con la estructura del software Lammps. Construcción de modelos. Dinámica NVE. Comprender el proceso de partición de la energía. Simulaciones de Dinámica Molecular en diferentes ensambles, introducción de solventes. Sistemas orgánicos. Sistemas Inorgánicos.

Actividad Práctica 2: Análisis de los experimentos *in silico* 1: Calculo energía libre. Aplicaciones con potenciales de campo medio.

Actividad Práctica 3: Análisis de los experimentos *in silico* 2: Utilizar y analizar un código que implementa el método NEB. Se analizaran las subrutinas más importantes. Se realizarán cálculos para determinar barreras de activación para los procesos de mayor relevancia (“Hopping”, “Schwoebel-Ehrlich 3D”, aleación, etc.).

Actividad Práctica 4: Métodos de Minimización de Energía: Utilizar y analizar un código que implementa métodos deterministas y estocásticos de minimización de energía en sistemas nanoscopicos. Se analizaran diferentes parámetros y condiciones de optimización. Se utilizaran metodos de optimizacion global de energia.

Actividad Práctica 5: Métodos Avanzados de Muestreo: Se analizara la aplicación a diferentes sistemas de nuevos metodos de calculo para acelerar los tiempos de simulacion.

III. Metodología de evaluación:

() Obligatoria () Optativa () Sin evaluación

Examen escrito teórico-práctico

Cronograma tentativo:

| Lunes 25/11 | Martes 26/11 | Miércoles 27/11 | Jueves 28/11 | Viernes 29/11 |
|--|--|---|---|---|
| (9-11 h) T1 café (11:30-13:30 h) T1-T2 | (9-11 h) T2 café (11:30-13:30 h) T2-T3 | (9-11 h) T3 café (11:30-13:30 h) T4 | (9-11 h)T4-T5 café (11:30-13:30 h) T5 | (9-11 h) TP1 café (11:30-13:30 h) TP1 |
| Lunes 02/12 | Martes 03/12 | Miércoles 04/12 | Jueves 05/12 | Viernes 06/12 |
| (9-11 h) T6 café (11:30-13:30 h) T6 | (9-11 h) TP2 café (11:30-13:30 h) TP2 | (9-11 h) TP3 café (11:30-13:30 h) TP3 | (9-11 h) T7 café (11:30-13:30 h) T7 | (9-11 h) TP4 café (11:30-13:30 h) TP4 |

IV - Bibliografía general

1. *Metal Clusters and Nanoalloys: From Modeling to applications*, M. M. Mariscal, O. A. Oviedo. E. P. M. Leiva. Springer (2012) NY.
2. *Notas del curso*. M. M. Mariscal, O.A. Oviedo, M. Villarreal, E. P. M. Leiva (2010)
3. *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*. David P. Landau , Kurt Binder. Cambridge University Press (2000) UK.
4. *Computational Physics*. Jos Thijssen. Cambridge University Press; 2 edition (2007)
5. *Computer Simulations of Liquids*. Allen & Tildesley. (Clarendon Press, Oxford 1987)
6. *Understanding Molecular Simulation: From Algorithms to Applications*. D. Frenkel y B. Smith, (Academic Press Limited, San Diego, CA, 1996).
7. *Molecular Dynamics Simulation – Elementary methods*. - Wiley - J. M. Haile, (Wiley Press. New York 1997).
8. *Numerical Simulation in Molecular Dynamics – Numerics, Algorithms, Parallelization, Applications*. M. Griebel, S. Knapek, G. Zumbusch, (Springer, Berlin 2007).
9. *Nanomaterials: design and simulation* – Ed.: P. Balbuena, J. M. Seminario, (Elsevier, Amsterdam 2007)

10. *Handbook of Metal Physics – Metallic Nanoparticles*. Ed. J. Blackman (Elsevier, Amsterdam 2009)
11. *Thermodynamics of small systems* – T. Hill. (W. A. Benjamin, Inc., New York, 1963, 1964)

Bibliografía específica:

12. *Nanoalloys -- From Fundamentals to Emergent Applications*, Florent Calvo, Elsevier (2013)
13. Effects of Oxidation on the Plasmonic Properties of Aluminum Nanoclusters O A Douglas-Gallardo, G J Soldano, M M Mariscal, C G Sanchez, *Nanoscale*. (2017) 9, 17471-17480
14. Mechanochemical stability of sub-nm ZnO chains, G. J. Soldano, F. M. Zanotto and M. M. Mariscal*, *Phys. Chem. Chem. Phys.* (2016) 18, 7688-7694
15. *Configurational Behavior and Conductance of Alkanedithiol Molecular Wires from Accelerated Dynamics Simulations*. A. S. Paz, M. Zoloff-Michof, C. F. A. Negre, J. A. Olmos-Asar, M. M. Mariscal, C. G. Sánchez & E.P.M. Leiva. *J. Chem. Theory Comput.* 11 (2012) 4539–4545
16. “Anchoring sites to the STM tip can explain multiple peaks in single molecule conductance histograms”, S.A. Paz, M.E. Zoloff-Michoff, C.F. Negre, J. Olmos-Asar, M.M. Mariscal, C.G. Sánchez, E.P.M. Leiva, E.P.M., *Phys. Chem. Chem. Phys.* 15(2013), 1526-1531
17. *Thermal properties of Co/Au nanoalloys and comparison of different computer simulation techniques*. A. Rapallo, J. A. Olmos-Asar, O. A. Oviedo, M. Ludueña, R. Ferrando and M. M. Mariscal*. *J. Phys. Chem. C*. 116 (2012) 17210-17218
18. *Development of a semiempirical potential for simulations of thiol-gold interfaces. Application to thiol-protected gold nanoparticles*. J. A. Olmos-Asar, A. Rapallo and M. M. Mariscal, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 13 (2011) 6500-6506
19. *On the Occurrence of Stable and Metastable States in Metallic Core-shell Nanoparticles* O. A. Oviedo, M. M. Mariscal E. P. M. Leiva. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 12 (2010) 4580 – 4589
20. *Thermodynamic considerations and computer simulations on the spontaneous formation of core-shell nanoparticles under electrochemical conditions*. O. A. Oviedo, E. P. M. Leiva and M. M. Mariscal, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 10 (2008) 3561
21. R. Ferrando, J. Jellinek and R. L. Johnston, *Chem. Rev.*, 108 (2008) 845.
22. F. Baletto and R. Ferrando, *Rev. Mod. Phys.*, 77 (2005) 371.
23. *A new simulation model for electrochemical metal deposition*- W. Schmickler, K. Pötting and M. Mariscal, *Chemical Physics*, 320 (2006) 149.