



EXP-UNC 8638/2009

RESOLUCIÓN DECANAL N° 95

VISTO:

La solicitud de los Dres. Marinao Zuriaga y Pablo Serra, en la cual proponen el dictado del curso “Introducción a la Teoría de la Materia Condensada: Dinámica Molecular, Transiciones de Fase y Sistemas Vítreos” como Especialidad para la Lic. en Física para el corriente año;

CONSIDERANDO:

Que este curso estará compuesto por dos módulos, uno a cargo del Dr. Marcelo Cargnano a dictarse durante el mes de mayo del corriente año, y el otro a cargo de los Dres. Mariano Zuriaga y Pablo Serra en los meses de octubre y noviembre;

Que, teniendo en cuenta el período de dictado del curso, es necesario establecer un período especial de inscripciones para esta asignatura y en consecuencia instruir al respecto al Área de Enseñanza;

Que la carga horaria total es la que corresponde a un curso de Especialidad e la Lic. en Física;

Que el dictado del curso finalizará junto con el período de clases del segundo cuatrimestre, y por lo tanto es conveniente incluirlo como Especialidad I;

Que se cuenta con el aval de la Secretaria Académica;

LA VICEDECANA DE LA FACULTAD DE MATEMÁTICA, ASTRONOMÍA Y FÍSICA  
“ad-referendum” del HCD  
R E S U E L V E:

ARTICULO 1°: Aprobar el dictado del curso “Introducción a la Teoría de la Materia Condensada: Dinámica Molecular, Transiciones de Fase y Sistemas Vítreos” como Especialidad I de la Licenciatura en Física.

ARTICULO 2°: Fijar como programa y correlativas de la materia, los detallados en el Anexo que forma parte de la presente Resolución.

ARTICULO 3°: Afectar a los Dres. Pablo Serra, Mariano Zuriaga y Marcelo Carignano como docentes encargados de la materia.

ARTICULO 4°: Establecer el período de inscripción a la materia desde el 4 al 8 de mayo del corriente, en el Departamento de Alumnos.

ARTICULO 5°: Elévese al H. Consejo Directivo, comuníquese y archívese.

CÓRDOBA, 21 de abril de 2009  
pk.



**ANEXO**  
RESOLUCIÓN HCD. N° 90/2009

**PROGRAMA DE ASIGNATURA**

<b>ASIGNATURA:</b> INTRODUCCIÓN A LA TEORÍA DE LA MATERIA CONDENSADA: DINÁMICA MOLECULAR, TRANSICIONES DE FASE Y SISTEMAS VITREOS	<b>AÑO:</b> 2009
<b>CARÁCTER:</b> Especialidad I – Licenciatura en Física	
<b>DOCENTE ENCARGADO:</b> Carignano, Marcelo – Serra, Pablo – Zuriaga, Mariano	

**CORRELATIVIDADES**

**Para cursar:**

Haber regularizado Termodinámica y Mecánica Estadística I.

**Para rendir:**

Haber aprobado Mecánica y Métodos Matemáticos de la Física.

**CONTENIDO**

**MÓDULO I:**

**a cargo del Dr. Marcelo Carignano**

Carga horaria

Clases teóricas: 36 hs.

Clases prácticas de laboratorio: 15 hs

1 – Simulaciones atomísticas y su alcance. Superficies de energía potencial. Conceptos generales de cálculos cuánticos y su relación con simulaciones clásicas. El problema de modelar la interacción entre moléculas. Mecánica estadística y simulaciones de Monte Carlo en diferentes ensambles.

2 – Simulaciones de dinámica molecular. Base teórica. Escalas de longitud y tiempo relevantes experimentalmente, y las posibilidades en simulaciones. Algoritmos de integración. Control de temperatura y presión.

3- GROMACS: un programa de simulaciones con código abierto. Topología, conformación inicial y control de la simulación. Ejemplos de simulaciones simples. Análisis de la trayectoria obtenida durante la simulación.

4- Campos de fuerza (Force Fields). Interacciones no ligadas: Potencial de Lennard-Jones. Potencial de Buckingham. Interacciones Coulombianas. Interacciones ligadas. Ligaduras armónicas, cuárticas y cúbicas. Potencial de Morse. Potencial FENE: modelos de cadenas poliméricas. Potenciales angulares: armónico, coseno, cuártico. Potencial Urey-Bradley. Potencial diedral impropio. Potencial diedral propio: periódico, Ryckaert-Bellemans, Fourier. Interacciones entre cuartos vecinos (1-4 interactions). Sitios



virtuales.

5- Interacciones de largo alcance. Sumas de Ewald. Sumas de Ewald sobre una grilla (Particle-mesh Ewald summation).

6- Modelos de agua como ejemplo típico: MCY, SPC/E, TIPnP, six-sites. Descripción del agua usando simulaciones por computadora. Diagrama de fase del agua, y diagrama de fase de los modelos de agua.

7- El campo de fuerza OPLS como un ejemplo de interacciones en biomoléculas.

8- Simulación de proteínas. Protein Data Bank. Preparación del sistema. Ejemplo: simulación de una cadena corta.

9- Integración termodinámica. Potencial químico. Potenciales de fuerza media. Diferencia de energía libre entre dos estados.

## **MÓDULO II**

**a cargo de los Dres. Pablo Serra y Mariano Zuriaga**

### Carga horaria

Clases teóricas: 24 hs.

Clases prácticas: 45 hs

1- Fenómenos críticos, generalidades, algunos modelos importantes.

Fenomenología de las transiciones de fase. Modelos definidos sobre redes: el modelo de Heisenberg de Ferromagnetismo, origen electrostático del Hamiltoniano de Heisenberg. El modelo de Heisenberg anisotrópico, casos particulares: X – Y e Ising. Modelos equivalentes al modelo de Ising: el gas de red y la aleación binaria. Otros modelos de interés: el modelo de Blume-Emery-Griffiths y de Blume-Capel, el modelo n-vectorial y su relación con otros modelos. No existencia de transición de fase en sistemas finitos; el límite termodinámico y el quiebre espontáneo de simetría.

2- Teorías Clásicas de Fenómenos Críticos.

Deducción de Orstein de la ecuación de Van der Waals. Fundamentación microscópica de la ecuación de Curie-Weiss. Comentarios generales sobre soluciones tipo campo medio. El principio variacional de Gibbs. Métodos variacionales: la desigualdad de Bogoliubov; aplicaciones: el modelo de Ising; el modelo de Blume-Capel; diagrama de fase, el punto tricrítico. Teoría fenomenológica de Landau para puntos críticos y tricríticos.

3- Sistemas Amorfo y Vítreos

Orden y desorden – reglas de ordenamiento – orden estructural. Ejemplos de materiales estructuralmente desordenados. Transformaciones orden-desorden. Cristalización y formación de vidrios. Transición vítrea, factores que determinan la temperatura de transición vítrea. Transiciones y escalas de tiempo. Transición vítrea dinámica, transición vítrea térmica. Entropía configuracional - paradoja de Kauzmann. Procesos de relajación. Separación de escalas de tiempo, relajación estructural  $a$  – relajación  $b$  y procesos Johari Goldstein. Clasificación de materiales formadores de vidrios según estructura y termodinámica; vidrios estructurales, conformacionales, orientacionales. Vidrios fuertes y frágiles. Investigación experimental de estructuras desordenadas; algunas técnicas experimentales para el estudio de orden de corto alcance, RX – NMR y NQR: relajación de spin cerca de  $T_g$ - Dinámica en el estado vítreo.



### BIBLIOGRAFÍA

- 1- D. Frenkel y B. Smit, *Understanding Molecular Simulation. From Algorithms to Applications*.
- 2- D. van der Spoel, E. Lindhal and B. Hess, *Gromacs manual v.4*.
- 3- E. Stanley, *Introduction to Phase Transition and Critical Phenomena*, Oxford University Press (1971)
- 4- K. Huang, *Statistical Mechanics, 2<sup>nd</sup>. ed.*, John Wiley & Sons (1987)
- 5- S. Salinas, *Introdução à Física Estatística*, Edusp (1997)
- 6- R. Zallen. *The Physics of amorphous solids* (1983)
- 7 – N. E. Cousack. *The physics of structurally disordered matter* (1988)
- 8 – Bohmer et. al. *Progress in NMR Spectroscopy*. 39, 191-267 (2001)
- 9- L. Leuzzi, T. Nieuwenhuizen. *Thermodynamics of the glassy state* (2008).