



EXP-UNC 8638/2009

RESOLUCIÓN HCD N° 90/09

VISTO:

La Resolución Decanal “ad-referendum” del HCD N° 95/2009, que aprueba 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;

CONSIDERANDO:

Que se han introducido modificaciones en el Anexo de dicha Resolución en lo que se refiere a las correlativas de la materia;

Que hay conformidad en cuanto a la modalidad y período de dictado del Curso, según lo especificado en los considerandos de la Resolución Decanal mencionada;

EL H. CONSEJO DIRECTIVO DE LA FACULTAD DE
MATEMÁTICA, ASTRONOMÍA Y FÍSICA
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°: Comuníquese y archívese.

DADA EN LA SALA DE SESIONES DEL H. CONSEJO DIRECTIVO DE LA FACULTAD DE MATEMÁTICA, ASTRONOMÍA Y FÍSICA, A LOS VEINTISIETE DÍAS DEL MES DE ABRIL DE DOS MIL NUEVE.

pk.



ANEXO
RESOLUCIÓN HCD. N° 90/2009

PROGRAMA DE ASIGNATURA

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

CORRELATIVIDADES

Para cursar:

Haber regularizado Mecánica y Métodos Matemáticos de la Física.

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 Amorfos 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, 2nd. 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).