



Universidad Nacional de San Luis  
Rectorado

**ES COPIA**  
COCOA C/LEONOR SEGURA  
Directora de Despacho  
UNSL

SAN LUIS, 17 JUN 2015

**VISTO:**

El Expediente EXP-USL: 5655/2015 mediante el cual se solicita la protocolización del Curso de Posgrado: **METODOLOGÍAS DE SIMULACIÓN NUMÉRICA PARA EL MODELADO DE LA ADSORCIÓN EN SISTEMAS POROSOS**; y

**CONSIDERANDO:**

Que el Curso de Posgrado se propone dictar en el ámbito de la Facultad de Ciencias Físico Matemáticas y Naturales del 19 de junio al 1° de julio de 2015, con un crédito horario de 20 horas presenciales y bajo la coordinación del Dr. Karim SAPAG.

Que la Comisión Asesora de Posgrado de la Facultad de Ciencias Físico Matemáticas y Naturales recomienda aprobar el curso de referencia.

Que el Consejo de Posgrado de la Universidad Nacional de San Luis en su reunión del 16 de junio de 2015, analizó la propuesta y observa que el programa del curso, bibliografía, metodología de evaluación y docentes a cargo, constituyen una propuesta de formación de posgrado de calidad en su campo específico de estudio.

Que, por lo expuesto, el Consejo de Posgrado aprueba la propuesta como Curso de Posgrado, según lo establecido en Ordenanza CS N° 23/09.

Que corresponde su protocolización.

Por ello y en uso de sus atribuciones

**EL RECTOR DE LA UNIVERSIDAD NACIONAL DE SAN LUIS**

**RESUELVE:**

**ARTÍCULO 1°.-** Protocolizar el dictado del Curso de Posgrado: **METODOLOGÍAS DE SIMULACIÓN NUMÉRICA PARA EL MODELADO DE LA ADSORCIÓN EN SISTEMAS POROSOS**, en el ámbito de la Facultad de Ciencias Físico Matemáticas y Naturales del 19 de junio al 1° de julio de 2015, con un crédito horario de 20 horas presenciales.

Cpde RESOLUCIÓN R N° **968**

*[Handwritten signature]*  
Ing. Jorge Natur Ojguin  
Vic. Rector - UNSL  
alc Rectorado RR N° 5655

*[Handwritten signature]*  
Dra. Alicia Marmola Primitista  
Secretaria de Posgrado  
U.N.S.L.



Universidad Nacional de San Luis  
Rectorado

"2015 - Año del Bicentenario del Congreso de los Pueblos Libres"

ES COPIA  
UNIVERSIDAD NACIONAL DE SAN LUIS  
SECRETARÍA DE POSGRADO  
UNSL

### ANEXO

**DENOMINACIÓN DEL CURSO: METODOLOGÍAS DE SIMULACIÓN NUMÉRICA PARA EL MODELADO DE LA ADSORCIÓN EN SISTEMAS POROSOS**

**UNIDAD ACADÉMICA RESPONSABLE:** Facultad de Ciencias Físico Matemáticas y Naturales

**CATEGORIZACIÓN:** Perfeccionamiento

**RESPONSABLE:** PhD. Carlos WEXLER

**COORDINADOR:** Dr. Karim SAPAG

**CRÉDITO HORARIO:** 20 horas

**MODALIDAD DE DICTADO:** Presencial

**FECHA DE DICTADO DEL CURSO:** 19 de junio al 1° de julio de 2015

**FECHA PREVISTA PARA ELEVAR LA NÓMINA DE ALUMNOS**

**APROBADOS:** Agosto de 2015

**DESTINATARIOS:** Egresados con título de grado universitario en Física, Química, Ingeniería Química, en Petróleo, en Materiales y en disciplinas afines a la temática del curso.

**LUGAR DE DICTADO:** Dpto. de Física – Ejército de los Andes 950 – San Luis

**CUPO:** 15 personas.

**FUNDAMENTACIÓN:** La Simulación numérica se ha convertido en los últimos años en un rama intermedia entre la teoría (pues permite validar sus hipótesis) y los experimentos (pues ayuda a la interpretación de los datos). Por este motivo es de importancia para un alumno de posgrado en el área de Ciencias de Superficies y Medios Porosos, Física y carreras afines alcanzar los conocimientos introductorios de un campo de fértil actividad y numerosas aplicaciones de carácter práctico. El curso está dirigido a profundizar en el conocimiento de los aspectos teóricos e instrumentales relacionados con la simulación numérica aplicada a medios porosos. Además de un análisis de la teoría que sustenta esta rama del conocimiento, se focalizará en la descripción y estudio de la adsorción de hidrógeno y metano en materiales porosos.

**OBJETIVOS:** Explicar las bases termodinámicas en las Metodologías de Monte Carlo y Dinámica Molecular y mostrar cómo se aplica en el estudio de la adsorción en materiales porosos. Comprender las interacciones moleculares por métodos *ab initio*.

**CONTENIDOS MÍNIMOS:**

1. Metodología del modelado

Cpde RESOLUCIÓN R N° 968

Ing. Jorge Raúl Oguin  
Vicerrector - UNSL  
al Rectorado - RR N° 95/15

Dra. Alicia Marmola Frattola  
Secretaría de Posgrado  
U.N.S.L.



Universidad Nacional de San Luis  
Rectorado

"2015 - Año del Bicentenario del Congreso de los Pueblos Libres"

ES COPIA  
CON M. GUILLERMO SEBASTIÁN  
Director de Despacho  
UNSL

2. Interacciones en el modelado
3. Introducción a métodos *ab initio* para la determinación de estructuras moleculares y potenciales de interacción.
4. Monte Carlo
5. Información obtenida de las simulaciones
6. Revisión resumida de métodos cuánticos y bases estadísticas
7. Ejemplo: Casos de aplicación en adsorción
8. Dinámica Molecular
9. Desafíos en el modelado computacional

#### PROGRAMA:

1. Metodología del modelado; Interdisciplinariedad, ventajas y desventajas, aproximaciones de multiescala. Construcción de materiales, modelos, software existente.
2. Interacciones en el modelado; campo de fuerzas (CF). Mecánica Molecular del CF. Interacciones no-enlazantes (interacciones electrostáticas: cargas puntuales, multipolos), van der waals (dispersión de London, Debye, Keesom).
3. Metodología *ab initio* (química cuántica) para determinación de estructuras moleculares e interacciones.
4. Monte Carlo: teoría, RNG, algoritmo de Metrópolis, MC parcial. Implementación de Metropolis en MC.
5. Información termodinámica obtenida de las simulaciones. Análisis de errores; dificultades (numéricas y físicas) en simulaciones computacionales.
6. Revisión resumida de métodos cuánticos y bases estadísticas. Introducción a la Física estadística, hipótesis Ergódica, teoría de MC. Cálculo de distribuciones de carga.
7. Ejemplo: Caso de aplicación: adsorción de hidrógeno, problema del almacenamiento de hidrógeno. Practica: analisis de los resultados de simulación.
8. Ejemplo: Caso de aplicación: adsorción de metano, problema del almacenamiento de gas natural. Practica: analisis de los resultados de simulación.
9. Dinámica Molecular (DM); paso dinámico de tiempo múltiple. DM con restricciones, Realización y funcionamiento de simulaciones de DM.
10. Desafíos en el modelado computacional: multiescala, energías libres, solvatación, reacciones.

#### SISTEMA DE EVALUACIÓN:

80% de asistencia. Aprobación del 100% de los trabajos prácticos. Aprobación de los seminarios. Aprobación de examen final integrador.

#### BIBLIOGRAFÍA:

- M.P. Allen, and D.J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids*, Oxford Science Publications (1987, and reprints), ISBN 0-19-855645-4.
- D. Frenkel, and B. Smit, *Understanding Molecular Simulation: from Algorithms to Applications*, Academic Press (2002), ISBN 0-12-267351-4.

Cpde RESOLUCIÓN R N° 968

Ing. Jorge Raúl Colquín  
Vicerrector - UNSL  
al Rectorado R N° 2515

Dr. Alicia Mercedes Printista  
Secretaría de Posgrado  
U.N.S.L.



Universidad Nacional de San Luis  
Rectorado

"2015 - Año del Bicentenario del Congreso de los Pueblos Libres"

ES COPIA  
CSCA. GUILLERMO BELLA  
Director de Despacho  
UNSL

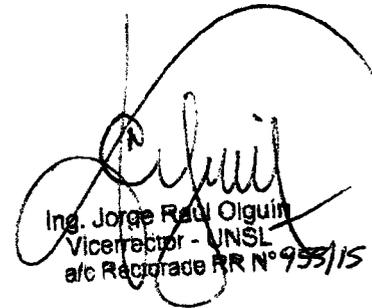
- M.E.J. Newman, and G.T. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, Clarendon Press (1999, reprinted with corrections 2001), ISBN 0-19-851796-3 (Hbk), ISBN 0-19-851797-1 (Pbk).

**ARANCEL:** Sin costo.

**COSTOS Y FUENTE DE FINANCIAMIENTO:** Programa César Milstein; Departamento de Física – UNSL; Instituto de Física Aplicada – UNSL – CONICET.

Cpde RESOLUCIÓN R N° **968**  
may

  
Dra. Alicia Mariana Príncipe  
Secretaría de Posgrado  
U.N.S.L.

  
Ing. Jorge Raúl Olguín  
Vicerrector - UNSL  
afc Rectorado RR N° 953/15