



"LAS MALVINAS SON ARGENTINAS"



UNIVERSIDAD NACIONAL DE SAN LUIS
RECTORADO

SAN LUIS, 7 de marzo de 2022

VISTO:

El EXP-USL: 15680/2021 mediante el cual se solicita la protocolización del Curso de Posgrado: SIMULACIÓN MOLECULAR: APLICACIONES AL ESTUDIO Y MODELADO DE LA ADSORCIÓN EN NANOMATERIALES; y

CONSIDERANDO:

Que el Curso de Posgrado se propone dictar en el ámbito de la Facultad de Ciencias Físico Matemáticas y Naturales del 31 de marzo al 02 de mayo de 2022 con un crédito horario de NOVENTA Y CINCO (95) horas presenciales y bajo la coordinación del Dr. Raúl Horacio LÓPEZ.

Que la Comisión Asesora de Posgrado de la Facultad de Psicología recomienda aprobar el curso de referencia.

Que el Consejo de Posgrado de la Universidad Nacional de San Luis en su reunión del 22 de febrero de 2022, 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 la RCS N° 400/2020 contiene las decisiones y propuestas de funcionamiento de las actividades de posgrado en el marco de la situación sanitaria vigente COVID – 19, y que esta actividad se enmarca en las acciones orientadas a continuar y sostener el dictado de las actividades previstas en cronogramas de estudiantes y propuestas.

Que, por lo expuesto, el Consejo de Posgrado aprueba la propuesta como Curso de Posgrado, según lo establecido en Ordenanza CS N° 35/2016.

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: SIMULACIÓN MOLECULAR: APLICACIONES AL ESTUDIO Y MODELADO DE LA ADSORCIÓN EN



"LAS MALVINAS SON ARGENTINAS"



UNIVERSIDAD NACIONAL DE SAN LUIS
RECTORADO

NANOMATERIALES, en el ámbito de la Facultad de Ciencias Físico Matemáticas y Naturales del 31 de marzo al 02 de mayo de 2022 con un crédito horario de NOVENTA Y CINCO (95) horas presenciales.

ARTÍCULO 2°.- Protocolizar el cuerpo docente constituido por: Responsables Dra. Valeria CORNETTE, DU N° 26297909, y Dr. Raúl Horacio LÓPEZ, DU N° 21704353, ambos de la Universidad Nacional de San Luis y CONICET, colaborador Dr. Juan Pablo TOSO, DU N° 13335523, de la Universidad Nacional de San Luis y Auxiliar Lic. Rodrigo Nahuel DELGADO MONS, DU N° 35105864, de la Universidad Nacional de San Luis y CONICET.

ARTÍCULO 3°.- Aprobar el programa del Curso de referencia, de acuerdo al ANEXO de la presente disposición.

ARTÍCULO 4°.- Comuníquese, Publíquese en el Digesto Administrativo de la Universidad Nacional de San Luis, insértese en el Libro de Resoluciones, y archívese.

MSS

Documento firmado digitalmente según Ordenanza Rectoral N° 15/2021 por: Rector MORIÑIGO, Víctor Aníbal – Secretaria de Posgrado REYES, Nora Susana



Universidad Nacional de San Luis
Rectorado

“LAS MALVINAS SON ARGENTINAS”

ANEXO

IDENTIFICACIÓN DEL CURSO

UNIDAD ACADÉMICA RESPONSABLE: Facultad de Ciencias Físico Matemáticas y Naturales

DENOMINACIÓN DEL CURSO: SIMULACIÓN MOLECULAR: APLICACIONES AL ESTUDIO Y MODELADO DE LA ADSORCIÓN EN NANOMATERIALES

CATEGORIZACIÓN: Perfeccionamiento

FECHA DE DICTADO DEL CURSO: del 31 de marzo al 02 de mayo de 2022

MODALIDAD DE DICTADO: Presencial.

Debido a la situación epidemiológica que atraviesa el territorio nacional por el COVID 19 y de acuerdo a lo establecido por Res. Rectoral N° 400/2020 el curso podrá dictarse excepcionalmente utilizando herramientas tecnológicas sincrónicas y garantizando la disponibilidad de contenidos, bibliografía, guías de trabajo prácticos, consultas a los estudiantes y todo otro material necesario en un formato electrónico.

CRÉDITO HORARIO TOTAL: 95 horas (40 horas teóricas, 55 horas de prácticas de aula)

COORDINADOR: Dr. Raúl Horacio LÓPEZ DU N° 21704353

EQUIPO DOCENTE

RESPONSABLES: Dra. Valeria CORNETTE y Dr. Raúl Horacio LÓPEZ

COLABORADOR: Dr. Juan Pablo TOSO

AUXILIAR: Lic. Rodrigo Nahuel DELGADO MONS

PROGRAMA ANALÍTICO

FUNDAMENTACIÓN:

La simulación computacional se ha convertido en los últimos años en una tercera forma de hacer ciencia, que se sitúa en algún punto medio entre los experimentos y la teoría analítica. Es complementaria a estas dos formas tradicionales de metodología científica y se beneficia de ambas para el desarrollo de modelos computacionales suficientemente precisos, para investigar los fenómenos de interés. A su vez, tanto los experimentos como la teoría, necesitan de las simulaciones para interpretar resultados o verificar modelos analíticos. Las simulaciones pueden estudiar hoy sistemas tan variados como gases, líquidos, sólidos, problemas biológicos, dispositivos nanoscópicos y muchísimos otros, en escalas desde Angstroms o nanómetros hasta micrómetros o incluso milímetros, para modelos sencillos. En este curso se propone un estudio actualizado e integral de técnicas de simulación computacional importantes como el Método de Monte Carlo para el estudio de sistemas de



Universidad Nacional de San Luis
Rectorado

“LAS MALVINAS SON ARGENTINAS”

muchos átomos o moléculas. Se fundamentarán las técnicas y modelos utilizadas en base a Mecánica Estadística. El curso tendrá una fuerte impronta práctica para formar al alumno en el uso de las técnicas explicadas. Se propondrá a los alumnos, asimilar los contenidos teóricos con la implementación de programas a lo largo del curso, de los cuáles el alumno deberá programar, analizar resultados y extraer información científica útil, usando herramientas típicas de un investigador del campo de la simulación computacional

OBJETIVOS

- Que el estudiante desarrolle las habilidades que permitan modelar materiales nanoestructurados así como distintos tipos de moléculas mediante técnicas de simulación computacional.
- Que el estudiante adquiera la capacidad de analizar diferentes propiedades termodinámicas, dinámicas y estructurales de diferentes sistemas moleculares.
- Que el estudiante logre comprender las bases Mecano Estadísticas del método de Monte Carlo y los principios básicos de la Dinámica Molecular y mostrar cómo se aplica en el estudio de la adsorción en nanomateriales.
- Que el estudiante logre comprender la física de las interacciones moleculares (gas-gas y sólido-gas) por métodos de primeros principios y analice los pro y los contra de los diversos potenciales de interacción que se usan actualmente en esta clase de sistemas.

CONTENIDOS MÍNIMOS

Introducción. ¿Qué es la simulación molecular? Metodología e Interacciones en el modelado. El método de Monte Carlo. Introducción a la Dinámica Molecular. Elección del Modelo. Nanomateriales porosos. Inicialización. Fundamentos Teóricos. Promedios termodinámicos simples. Propiedades termodinámicas desde las fluctuaciones. Propiedades estáticas. Propiedades dinámicas. Coeficientes de transporte. Aplicaciones. Adsorción como herramienta de caracterización.

PROGRAMA DETALLADO:

1. ¿Qué es la simulación molecular? Diferencia entre el Modelado y la Simulación. Escalas. Métodos de Simulación Atomísticos. Modelando el Nanomaterial. Modelando el gas. La Adsorción. Métodos continuos.
2. El método de Monte Carlo. Muestreo de importancia. El método de Metrópolis. Un algoritmo Básico de Monte Carlo: el algoritmo, detalles técnicos. Balance versus Balance detallado. Movimientos de prueba: Movimientos traslacionales y orientacionales.
3. Introducción a la Dinámica Molecular. Campos de Fuerzas Clásicos. Conexión con la Mecánica Estadística.
4. Elección del Modelo. Ensamblajes de la Simulación. El potencial interatómico. La forma del potencial. Implementación.



Universidad Nacional de San Luis
Rectorado

“LAS MALVINAS SON ARGENTINAS”

5. Inicialización. Condiciones iniciales y condiciones de contorno. Fundamentos Teóricos. Promedios termodinámicos simples. Energía. Temperatura. Presión. Propiedades termodinámicas desde las fluctuaciones. Propiedades estáticas. Función de distribución Radial.

6. Aplicaciones. Adsorción como herramienta de caracterización: Conceptos Básicos. Adsorción Física: la isoterma de adsorción, fuerzas de adsorción, sólidos porosos y no porosos. Modelado computacional de sólidos nanoporosos (Adsorbente). Modelos de nanomateriales con diferentes geometrías (CA, SBA15, CMK-3, etc.) Modelado computacional del adsorbato: Modelos Moleculares de moléculas simples (CH₄, H₂, N₂, Ar). Cálculo de las distribuciones de tamaño de poros a partir de Simulación de Monte Carlo. Método de Regularización. Comparación con métodos de caracterización clásicos. Obtención de las entalpías diferenciales de adsorción.

SISTEMA DE EVALUACIÓN:

Aprobación del 100% de los Trabajos Prácticos. Aprobación de los seminarios, y de la realización e implementación de una simulación computacional de un sistema de interés, de forma individual.

BIBLIOGRAFÍA

- Frenkel D, Smit B (2002) Understanding Molecular Simulations: from Algorithms to Applications, Academic Press San Diego.
- Allen MP, Tildesley DJ (1987) Computer simulation of liquids. Oxford University Press, New York.
- Sadus R.J (2002) Molecular Simulation of Fluids. Elsevier Science.
- Gregg, S.J. and Sing, K.S.W (1982), Adsorption, Surface Area and Porosity, Academic Press.
- Nicholson D, and Parsonage N.G (1982), Computer Simulation and the Statistical Mechanics of Adsorption, Academic Press, NY.
- Delgado, R., Cornette, V., Toso, J. P., Soares, D., & Lopez, R. (2019). *Effects of potential models on nitrogen adsorption on triangular pore: An improved mixed model for energetic characterization of activated carbon*. *Applied Surface Science Journal*, 481(February), 1035–1043. <https://doi.org/10.1016/j.tiv.2019.03.006> .
- Yelpe, V., Cornette, V., Toso, J. P., & López, R. H. (2017). *Characterization of nanostructured carbon CMK-3 by means of Monte Carlo simulations*. *Carbon*, 121, 106–113. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2017.05.085> .



Universidad Nacional de San Luis
Rectorado

“LAS MALVINAS SON ARGENTINAS”

- Cornette, V., Villarroel-Rocha, J., Sapag, K., Delgado Mons, R., Toso, J. P., & López, R. H. (2020). *Insensitivity in the pore size distribution of ultramicroporous carbon materials by CO₂ adsorption*. Carbon, 168, 508–514. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2020.07.011> .

CARACTERÍSTICAS DEL CURSO

DESTINATARIOS Y REQUISITOS DE INSCRIPCIÓN: Profesionales de carreras universitarias o carreras con 4 años de duración como mínimo: Egresados con título universitario de Lic. en Física, Química y/o carreras afines a la temática del curso.

CUPO: mínimo: 2 personas, máximo: 20 personas.

PROCESO DE ADMISIÓN: Se evaluará el CV de los postulantes y su formación previa.

CRONOGRAMA DE ACTIVIDADES:

Fecha	Actividad	Docente/s Responsable/s	Ámbito.
Semanas 1 y 2	Bolilla 1 y 2	López-Cornette	Aulas del Dpto. de Física. Bloque II
Semanas 3, 4, 5 y 6	Bolilla 3 y 4	Cornette	Aulas del Dpto. de Física. Bloque II
Semanas 7, 8, 9 y 10	Bolilla 5 y 6	Toso-Cornette-López-Delgado Mons.	Aulas del Dpto. de Física. Bloque II
9 hs de Clase por semana en 3 días de 3 hs. Más 5 hs. de consulta para los Seminarios.			

LUGAR DE DICTADO: Aulas y Laboratorios del Dpto. de Física del Bloque II (FCFMyN-UNSL)

FECHA PREVISTA PARA ELEVAR LA NÓMINA DE ALUMNOS APROBADOS: Julio de 2022

FINANCIAMIENTO DEL CURSO

COSTOS: Materiales e insumos

FUENTES DE FINANCIAMIENTO: Dpto de Física e INFAP (UNSL-CONICET) y los Proyectos: PROICO 03-1218 (UNSL), PIP (11220200101618 - CONICET) y PICT 2019 (Res. MinCyT 15/2021).

ARANCEL GENERAL: Gratuito.

Hoja de firmas