
**Curso: Escuela de Simulación Molecular de Materiales.
Cronograma Tentativo**

Lunes 30 de Julio de 2018 – día 1:

9:00 a 10:30 hs. Teórica 1. Dr. Darío Estrin, L. Martínez - Introducción a los métodos de simulación computacional en Química.

10:30 a 12:00 hs. Teórica 2. Dr. Darío Estrin- Métodos de estructura electrónica (Parte 1). Método de Hartree Fock. Cálculo de propiedades moleculares.

12:00 a 13:00 hs. Almuerzo

13:00hs a 18:00 hs. Tiempo libre para realización trámites CELFI

Martes 31 de Julio 2018 – día 2.

9:00 a 12:30 hs. Teórica 3 . Dr. Damián Scherlis.

Métodos de estructura electrónica Parte 2. Métodos semiempíricos, post Hartree Fock y teoría del funcional de la densidad.

12:30 a 14:00 hs. Almuerzo

14:00hs a 18:00 hs. Práctica 1 . Dra. Luciana Capece- Ari Zeida, L. Martínez.

Cálculos de estructura electrónica y parametrización.

Miércoles 1 de Agosto de 2018– día 3.

9:00 a 11:30 hs. Teórica 4 Dres. Darío Estrin y Ari Zeida. Campos de fuerzas clásicos.

11:30 a 13:00 hs. Teórica 5. Dr. Mariano González Lebrero. Arquitecturas de cómputo.

13:00 a 14:00 hs. Almuerzo y posters

14:00hs a 18:00 hs. Teórica 6. Leandro Martínez. Termodinámica Estadística y dinámica Molecular.

Jueves 2 de Agosto. Día 4.

9:00 a 12:30 hs. Teórica 7. Dr. Leandro Martínez. Técnicas de determinación de energías libres.

12:30 a 14:00 hs. Almuerzo

14:00hs a 18:00 hs. Práctica 2 Dr. Leandro Martínez y Ari Zeida. Métodos de determinación de energías libres.



Viernes 3 Agosto de 2018 – día 5.

9:00 a 11:00 hs. Teórica 8 – Dr. Darío Estrin: Métodos multi escala QM-MM.

11:00 a 13:00 Teórica 9. Dr. Damián Scherlis: Estructura electrónica de sistemas extendidos.

13:00 a 14:00 hs. Almuerzo

14:00hs a 18:00 hs. Práctica 3. Dr. Ari Zeida: Dinámica molecular clásica de proteínas.

Lunes 6 de Agosto de 2018 – día 6

9:00 a 12:30 hs. Teórica 10 –Dr Damian Scherlis. DFT en sistemas extendidos y dinámica de Car-Parrinello.

12:30 a 14:00 hs. Almuerzo

14:00hs a 18:00 hs. Práctica 4 – Dr. de la Llave Quantum Espresso.

Martes 7 de Agosto de 2018 – día 7

9:00 a 12:30 hs. Teórica 11 – Dra V. Ferrari. Magnetismo.

12:30 a 14:00 hs. Almuerzo

14:00hs a 18:00 hs. Práctica 5 – Dr. Damian Scherlis y Gerhard Hummer. Quantum Espresso parte 2.

Miércoles 8 de Agosto de 2018 –día 8

9:00 a 10:30 hs. Teórica 12 – Dr. Cristian Sánchez. Transporte electrónico.

11:00 a12:30 hs. Teórica 13 - Dr. Gerhard Hummer. Métodos de muestreo avanzado en materiales.

12:30 a 14:00 hs Almuerzo

14:00hs a 18:00 hs. Teórica 13-. – Dr. Cristian Sánchez. Transporte electrónico. Parte 2.

Jueves 9 de Agosto de 2018 –día 9

9:00 a 12:30 hs. Práctica 6. – Dr. Cristian Sánchez. Métodos para estudiar transporte electrónico.

12:30 a 14:00 hs Almuerzo

14:00hs a 18:00 hs. Práctica 7 – Dres. de la Llave y Gerhard Hummer: Quantum Espresso y Método de Car-Parrinello.



Viernes 10 de Agosto de 2018 – día 10.

9:00 a 12:30 hs. Puesta en común y cierre.

12:30 a 14:00 hs Almuerzo

14:00hs a 18:00 hs. Presentación de trabajo integrador por parte de los alumnos.