
TÓPICOS DE FÍSICA COMPUTACIONAL

1.- Datos generales

1.1 Denominación de la asignatura: **Tópicos de Física Computacional**

1.2 Carga horaria total: 64hs

1.3 Período del dictado (semestre y año) : Octubre-Diciembre 2013

2.- Composición del Equipo Docente: Responsable, Auxiliares.

2.1. Responsable a cargo

Apellido y nombres: **Domínguez, Daniel**

2.3. Auxiliares

Apellido y nombres: **Hernández, Alexander**

3.- Contenidos y Programa

Temas avanzados de Física Computacional con aplicaciones en Materia Condensada.
Problemas-ejemplo desarrollados:

1- Dinámica molecular

Algoritmos de Verlet, algoritmos simplécticos. Condiciones periódicas de contorno, imágenes, mínima imagen. Condiciones iniciales. Ensamble microcanónico. Control de la temperatura, ensamble canónico, algoritmo de Nosé-Hoover. Métodos eficientes (orden N) para evaluación de fuerzas, método de linked-list. Función de distribución radial y factor de estructura. Coeficiente de difusión. Aplicación al estudio de la transiciones de fase sólido-líquido y líquido-gas.

2- Elementos de Metodos Ab-Initio

Aproximacion de Born-Oppernheimer. Sistemas multielectronicos, intercambio, metodo de Hartree-Fock. Teoria de funcional densidad. Ecuaciones de Kohn y Sham. Aproximacion de densidad local (LDA). Aplicaciones de Hartree-Fock y de LDA al calculo del estado fundamental del atomo de Helio. Nociones del método de Carr-Parrinello.

2- Tecnicas especiales de MonteCarlo. Monte Carlo Cuántico.

Monte Carlo Variacional (VMC). Funciones de prueba. Ecuacion de difusion y caminatas al azar. Monte Carlo por Difusion (DMC). Funcion guia. Dificultades en sistemas fermionicos, método de los nodos fijos. Aplicaciones de VMC y DMC al calculo del estado fundamental del átomo de Helio, comparación con LDA.

4.- Evaluación:

Participación de las clases y entrega de informes escritos de los problemas propuestos.
Aprobación de un informe final escrito.

5.- Bibliografía:

J. M. Thijssen, "Computational Physics".

D. Landau and K. Binder, "A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics"

Allen-Tildesley: "Molecular simulation of liquids"

W. Krauth, "Statistical Mechanics: Algorithms and Computations"