

## Curso: **Armar un programa de Dinámica Molecular**

**Objetivo:** Que los participantes conozcan y programen las ecuaciones relacionadas con el potencial de interacción y las ecuaciones de movimiento que incorporan temperatura y presión. Que analicen programas de análisis de resultados de las propiedades básicas.

**Requisitos:** De preferencia que hayan escrito un programa de dinámica molecular para el potencial de Lennard-Jones.

El curso está dirigido a usuarios de programas de dinámica molecular (Gromacs, DL\_POLY, NAMD o LAMMPS) que tengan conocimientos básicos de fortran o C.

Para inscribirse deberán disponer de tiempo completo para este curso.

### **Cupo limitado a 15 participantes**

Se proporcionarán rutinas con la información básica y se integrarán para construir el programa de DM. Los programas se aplicarán para estudiar sistemas tales como, agua, hidrocarburos, alcoholes, entre otros.

**Proyectos.** Durante el curso los alumnos elaborarán un proyecto que presentarán al final del curso.

### **Profesor:**

Dr. José Alejandro, Depto. de Química, UAM-Iztapalapa.

Las sesiones serán de 10:00 a 14:00 horas y de 15:30 a 17:30 horas. El quinto día se dará sólo la sesión matutina.

## **Programa**

### **Primer día: Potenciales de interacción y dinámica molecular**

Oscilador armónico, ángulos de enlace y diedros

Lennard-Jones y Coulomb

Ecuaciones de movimiento. Algoritmo NVE

valores promedio de cantidades termodinámicas (energía, temperatura, etc)

Definición de proyectos

### **Segundo día: Algoritmos NVT en Dinámica Molecular**

Termostatos: Re-escalar velocidades, Berendsen y cadenas de Nosé-Hoover

Función de distribución radial

Fluctuación de la energía y calor específico

Funciones de autocorrelación: autodifusión

### **Tercer día: Presión y las sumas de Ewald**

Derivación e implementación de las ecuaciones de la presión

Tensión superficial. Aplicación al equilibrio líquido-vapor

### **Cuarto día: Presión y algoritmos NPT en Dinámica Molecular**

Obtención de la presión en sistemas moleculares

Barostato de Berendsen y las cadenas de Nosé-Hoover

Densidad, fluctuación del volumen y compresibilidad isotérmica

### **Quinto día: Presentación de proyectos**