

ESCUELA ARGENTINA DE CATÁLISIS 2023

“Una introducción a la catálisis computacional utilizando Quantum ESPRESSO”

PROGRAMA:

Actividad 1: Breve introducción al programa Quantum ESPRESSO (teórica)

Actividad 2: Algunos cálculos simples con Quantum ESPRESSO (teórica)

Actividad 3: Cálculos simples con Quantum ESPRESSO (práctica)

Actividad 4: Cálculos simples con Quantum ESPRESSO (práctica)

Actividad 5: Modelado de superficies en Quantum ESPRESSO (teórica)

Actividad 6: Reacciones químicas en superficies con Quantum ESPRESSO (teórica)

Actividad 7: Cálculo de propiedades de superficies con Quantum ESPRESSO (práctica)

Actividad 8: Cálculo de reacciones químicas con Quantum ESPRESSO (práctica)

LUGAR Y FECHA DE REALIZACIÓN: 13 y 14 de noviembre en el Complejo Universitario de la Universidad Nacional de Salta.

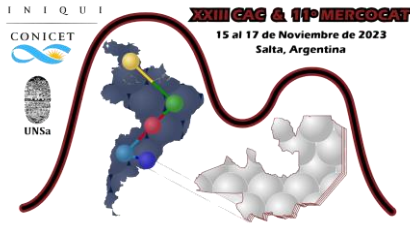
TEORÍAS: Aula de Seminario del Edificio de Química-Facultad de Cs. Exactas (1^{er} piso, ver mapa al final del documento)

PRÁCTICAS: Sala de Cómputos de la Facultad de Ingeniería (Sala 511, 1^{er} piso)

CRONOGRAMA

Horario	Lunes 13 de noviembre	Martes 14 de noviembre
9:00 a 10:45	Actividad 1	Actividad 5
10:45 a 11:15	Break	Break
11:15 a 13:00	Actividad 2	Actividad 6
13:00 a 14:00	Almuerzo	Almuerzo
14:00 a 15:45	Actividad 3	Actividad 7
15:45 a 16:15	Break	Break
16:15 a 18:00	Actividad 4	Actividad 8

XXIII CAC & XI MERCOCAT



MODALIDAD DE TRABAJO: clases teóricas presenciales por la mañana, trabajos prácticos computacionales por la tarde.

EVALUACIÓN: las y los concurrentes deberán resolver un problema utilizando herramientas computacionales y en un plazo determinado, al finalizar el Congreso.

BIBLIOGRAFÍA:

- 1) Quantum ESPRESSO Course for Solid-State Physics, N. T. Hung, A. R. T. Nugraha, R. Saito, Jenny Stanford Publishing Pte. Ltd., 2023.
 - 2) *Electronic Structure - Basic Theory and Practical Methods*, Richard M. Martin, Cambridge University Press, 2020
 - 3) *Density Functional theory - a Practical Introduction*, David S. Scholl, Janice A. Steckel, John Wiley & Sons, Inc., 2009
-

Universidad Nacional de Salta

Mi sabiduría viene de esta tierra



<https://www.unsa.edu.ar/index.php/plano-del-campus/>