FORMULARIO PARA LA PRESENTACIÓN DE PROGRAMAS DE ASIGNATURAS

Año Lectivo: 2022

UNIVERSIDAD NACIONAL DE RÍO CUARTO
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS, FCO-QCAS Y NATURALES
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

CARRERA/S: LICENCIATURA EN FISICA

PLAN DE ESTUDIOS: 2010 – Versión 0

ASIGNATURA: Especialidad III **CÓDIGO:** 2257

MODALIDAD DE CURSADO: Presencial

DOCENTE RESPONSABLE: Manuel Otero, Dr., Profesor Adjunto Simple, interino.

EQUIPO DOCENTE: Manuel Otero, Dr., Profesor Adjunto Simple, interino.

RÉGIMEN DE LA ASIGNATURA: Cuatrimestral

UBICACIÓN EN EL PLAN DE ESTUDIO: 5to Año 2do Cuatrimestre

RÉGIMEN DE CORRELATIVIDADES: para cursar

Asignaturas aprobadas: no requiere.

Asignaturas regulares: Electromagnetismo II (2246) y Especialidad I (2252).

CARÁCTER DE LA ASIGNATURA: Obligatoria

CARGA HORARIA TOTAL: 112 horas

Teóricas:	**56 hs**	**Prácticas:**	**56 hs**	**Teóricas - Prácticas:**	**0 hs**	**Laboratorio:**	**0 hs**

CARGA HORARIA SEMANAL: 8 horas

Teóricas:	**4 hs**	**Prácticas:**	**4 hs**	**Teóricas - Prácticas:**	**0 hs**	**Laboratorio:**	**0 hs**

1. CONTEXTUALIZACIÓN DE LA ASIGNATURA

La asignatura Especialidad III (2248) titulada "Teoría del funcional de la densidad electrónica (DFT)", corresponde a la carrera Licenciatura en Física, que ofrece la Facultad de Ciencias Exactas Físico-químicas y Naturales de la Universidad Nacional de Río Cuarto. El Programa Analítico se elaboró según el *Régimen de Enseñanza de Grado la Facultad de Ciencias Exactas* en base a lo establecido en el *Texto Ordenado del Plan de Estudios* de Licenciatura en Física propuesto en el año 2010. Para el estudio de la Especialidad III es necesario comprender los fenómenos y cálculos físico-matemáticos incluidos en las asignaturas previas denominada Electromagnetismo II y Especialidad I, que abordan temas propios del electromagnetismo clásico y la descripción cuántica de sólidos. El conjunto de estos conceptos se considera esencial para arribar a la descripción detallada de la materia mediante la teoría del funcional de la densidad electrónica (DFT). La misma, permite una resolución iterativa de la ecuación de Schrödinger para sistemas multielectrónicos de donde se derivan múltiples propiedades, entre las cuales se destacan la energía del sistema, la densidad de estados electrónicos y las densidades de carga electrónica. La obtención de dichas propiedades habilita una correlación entre resultados teórico-computacionales y estudios experimentales estructurales, espectroscópicos y físico-químicos, entre otros, para diversos materiales. Esto lleva a que muchas/os investigadoras/es en física se aboquen al estudio y aplicación del DFT como parte de su quehacer científico volviéndolo de gran interés para estudiantes de los últimos años de la carrera Licenciatura en Física.

2. OBJETIVOS PROPUESTOS

El objetivo general de esta asignatura es contribuir a la formación en el estudio mecano-cuántico de materiales aplicando técnicas de cálculos computacionales El propósito de las actividades propuestas es que las/los estudiantes adquieran conocimientos teóricos básicos sobre la teoría del funcional de la densidad electrónica (DFT) y que apliquen los mismos en sistemas periódicos modelo, para desarrollar las habilidades de obtención y análisis de datos característicos de la técnica. También se brinda un panorama de algunos temas de investigación actuales, con el propósito de familiarizar las/los estudiantes con diferentes líneas de trabajo de investigación en física y con del desarrollo de técnicas de avanzada y sus aplicaciones en ciencia y tecnología. Finalizado el curso las/los estudiantes habrán adquirido la experiencia suficiente y las competencias necesarias para iniciar este tipo de estudios como así también para interpretar críticamente trabajos científicos de base teórica.

3. EJES TEMÁTICOS ESTRUCTURANTES DE LA ASIGNATURA Y ESPECIFICACIÓN DE CONTENIDOS

3.1. Contenidos mínimos

Teoremas de Hohenberg y Kohn y ecuaciones de Kohn-Sham; energía de correlación e intercambio; pseudopotenciales; cálculos de energía y optimización de geometría; cálculos de

densidad de estados (DOS y pDOS); cálculos de cargas electrónicas; método de la banda elástica (NEB).

3.2. Ejes temáticos o unidades

Unidad I: Conceptos previos al DFT

1.1 Física cuántica multielectrónica: ecuación de Schrödinger para sistemas de varios cuerpos, aproximación adiabática (Born-Oppenheimer), determinantes de Slater, método de Hartree-Fock

1.2 Física del estado sólido: red cristalina, sistemas periódicos, redes de Bravais, espacio real (celda unidad, vectores de red y base), espacio reciproco y zona de Brillouin, análisis de Fourier, teorema de Bloch.

Unidad II: Bases teóricas del DFT

2.1 Teoría del funcional de la densidad electrónica (DFT): Teoremas I y II de Hohenberg y Kohn.

2.2 Sistema Auxiliar de Kohn-Sham: ecuaciones variacionales de Kohn-Sham, soluciones autoconsistentes (SCF). Parámetros de convergencia.

2.3 Energía de correlación e intercambio: Hueco de correlación e intercambio, Aproximación de densidad local (LDA), aproximación de gradiente generalizado (GGA), aproximaciones avanzadas: mGGA e híbridos.

Unidad III: Introducción al cálculo con DFT

3.1 Ondas planas: Descripción del sistema periódico a partir de la base. Densidad del muestreo en el espacio real y en el espacio recíproco (energías de corte y puntos k). Integrales en el espacio reciproco.

3.2 Pseudopotenciales: Aproximación de carozo congelado. Pseudopotenciales que conservan la norma, “ultrasoft” y PAW.

3.3 Paquete de programas QUANTUM ESPRESSO para el cálculo de propiedades de materiales en base al DFT en el formalismo de ondas planas.

Unidad IV: Cálculos de propiedades en materiales

4.1 Cálculos de energía: definición de cristales, optimización de geometría, parámetros de red y distancias interatómicas. Relajación estructural y de celda.

4.2 Estructura electrónica: Densidad de estados (DOS), densidad de estados parcial o proyectada (pDOS), estructura de bandas, band gap y energía de fermi.

4.3 Cargas electrónicas: Bader, Voronoi, Mulliken y densidad electrónica diferencial (Charge difference).

4.4 Método de la banda elástica (NEB): Cálculo de movilidad y caminos de reacción.

4. ACTIVIDADES A DESARROLLAR

Se propone una metodología de trabajo basada en una serie de actividades seleccionadas y diseñadas con el propósito de fomentar la adquisición de conocimientos integrados de conceptos básicos del DFT y su simultanea aplicación práctica

CLASES TEÓRICAS: Dr. Manuel Otero, presencial, expositivas y de discusión, Power Point y pizarrón, 4hs semanales

CLASES PRÁCTICAS: Dr. Manuel Otero, presencial, resolución de guías prácticas, computadora y pizarrón, 4hs semanales

CLASES DE TRABAJOS PRÁCTICOS DE LABORATORIO: no aplica

OTRAS: Dr. Manuel Otero, presencial, parciales teórico-prácticos, computadora, 4hs cada parcial.

5. PROGRAMAS Y/O PROYECTOS PEDAGÓGICOS INNOVADORES E INCLUSIVOS

6. CRONOGRAMA TENTATIVO DE CLASES E INSTANCIAS EVALUATIVAS

Semana	Día/Horas	Actividad: tipo y descripción*
1-2	Lunes y viernes, 4hs c/d	Clases Teóricas y Prácticas: Eje temático 1.1 y 1.2
3-4	Lunes y viernes, 4hs c/d	Clases Teóricas y Prácticas: Eje temático 2.1 y 2.2
5-6	Lunes y viernes, 4hs c/d	Clases Teóricas y Prácticas: Eje temático 2.3 y 3.1
7	Lunes y viernes, 4hs c/d	Consultas e Instancia evaluativa: Primer Parcial
8-9	Lunes y viernes, 4hs c/d	Clases Teóricas y Prácticas: Eje temático 3.2 y 3.3
10-11	Lunes y viernes, 4hs c/d	Clases Teóricas y Prácticas: Eje temático 4.1 y 4.2
12-13	Lunes y viernes, 4hs c/d	Clases Teóricas y Prácticas: Eje temático 4.3 y 4.4
14	Lunes y viernes, 4hs c/d	Consultas e Instancia evaluativa: Segundo Parcial
15	Lunes y viernes, 4hs c/d	Recuperatorios y Carga de Regularidades

*Teóricos, teóricos-prácticos, trabajos de laboratorios, salidas a campo, seminarios, talleres, coloquios, instancias evaluativas, consultas grupales y/o individuales, otras.

7. BIBLIOGRAFÍA

7.1. Bibliografía obligatoria y de consulta

- David S. Sholl, Janice A. Steckel - Density Functional Theory: A Practical Introduction. Wiley Editorial (2009).

- Richard M. Martin - Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods. Cambridge University Press (2020).
- Jorge Kohanoff - Electronic Structure Calculations for Solids and Molecules: Theory and Computational Methods. Cambridge University Press (2006).
- Feliciano Giustino - Materials Modelling using Density Functional Theory. Oxford University Press (2014).
- Charles Kittel - Introduction to Solid State Physics. Wiley (2008).

7.2. Otros: materiales audiovisuales, enlaces, otros.

8. DÍA Y HORARIOS DE CLASES

Lunes de 9 a 13hs

Viernes de 13 a 19hs

9. DÍA Y HORARIO DE CLASES DE CONSULTAS

Jueves de 16 a 17hs

10. REQUISITOS PARA OBTENER LA REGULARIDAD Y LA PROMOCIÓN

Requisitos para la obtención de la regularidad:

- Participar al menos del 80% de las actividades propuestas durante el curso.
- Aprobar los dos parciales presenciales teórico-prácticos previstos con una calificación mínima de cinco puntos.
- El alumno dispondrá de un recuperatorio por cada parcial, que también se aprueba con una calificación mínima de cinco puntos.

La materia no posee régimen de promoción.

11. CARACTERÍSTICAS, MODALIDAD Y CRITERIOS DE LAS INSTANCIAS EVALUATIVAS

Evaluaciones Parciales:

Se toman dos parciales, la modalidad es examen escrito teórico-práctico. El alumno dispone de dos recuperatorios, uno para cada parcial.

Evaluación Final:

Examen final regular: Examen escrito de ejercicios de prácticos. Examen oral sobre aspectos teórico-prácticos.

Examen final libre: Examen escrito de ejercicios de prácticos. Examen oral sobre aspectos teórico-prácticos.

Los parciales y recuperatorios antes mencionados consistirán en la presentación y análisis de actividades similares a las trabajadas en durante el curso. El equipo docente estará disponible durante el examen para responder consultas relacionadas con los enunciados establecidos.

Firma Profesor/a Responsable **Firma Secretario/a Académico/a**