

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

U.B.A

- 1 .- DEPARTAMENTO : **FISICA**
- 2 .- CARRERA de: a) Licenciatura en..... ORIENTACION.....
 b) Doctorado y/o Post-Grado en..... **Doctorado**.....
 c) Profesorado en.....
 d) Cursos Técnicos en Meteorología.....
 e) Cursos de Idiomas.....
- 3 .- 1er. CUATRIMESTRE/2do. CUATRIMESTRE Año: **2do. cuatrimestre 1995**
- 4 .- N° DE CODIGO DE CARRERA:
- 5 .- MATERIA: **TEORIA DE LA FUNCIONAL DENSIDAD:**
FUNDAMENTOS Y APLICACIONES..... N° DE CODIGO
- 6 .- PUNTAJE PROPUESTO : **5(cinco) puntos**
- 7 .- PLAN DE ESTUDIO : **1957/1987**
- 8 .- CARACTER DE LA MATERIA: **Optativa**
- 9 .- DURACION: **Cuatrimestral**
- 10 .- HORAS DE CLASES SEMANAL: **8(ocho) puntos**
 - a) Teóricas.....**4**..... hs. d) Seminarios..... hs.
 - b) Problemas..... hs. e) Teórico-problemas..... hs.
 - c) Laboratorio..... hs. f) Teórico-prácticas...**4**..... hs.
 - g) Totales Horas:.....**8**..... hs.
- 11.- CARGA HORARIA TOTAL:.....**8**.....hs.
- 12.- ASIGNATURAS CORRELATIVAS:
- 13.- FORMA DE EVALUACION: **Parciales - Examen Final**
- 14.- PROGRAMA ANALITICO: **(Se adjunta)**
- 15.- BIBLIOGRAFIA: **(Se adjunta)**

FECHA: **27 OCT 1994**

FIRMA PROFESOR:

FIRMA DIRECTOR:

ACLARACION FIRMA: **Dra. Ana María Llois**

Dr. GUILLERMO DUSSEL
DIRECTOR
DEPARTAMENTO DE FISICA

APROBADO POR RESOLUCION **ED N° 1559/95**

2do. Cuatrimestre de 1994

Materia de Doctorado:

TEORIA DE LA FUNCIONAL DENSIDAD: FUNDAMENTOS Y APLICACIONES.

UNIDAD I : Más allá de la aproximación del electrón independiente para el problema de N electrones.

1. Aproximación de Hartree. Aproximación Hartree-Fock. Teorema de Koopman. Potencial de intercambio para electrón libre. Teoría Hartree Fock para el electrón libre.

2. La densidad electrónica como variable fundamental:

Antecedente histórico: Aproximación de Thomas Fermi. Principio de mínima energía en la teoría de Thomas Fermi. Mejoras al modelo de Thomas Fermi. Tratamiento local de la energía de intercambio de Slater-Dirac.

Teoría de la funcional densidad: Teorema de Hohenberg y Kohn.

Extensiones del teorema de Hohenberg y Kohn a sistemas de partículas con espín y sistemas que se encuentran a temperatura finita.

3. **Procedimientos de cálculo dentro del marco de la teoría de la funcional densidad:** Descripción exacta de un sistema de muchas partículas en términos de ecuaciones de una partícula. Derivación de las ecuaciones de Kohn y Sham. Funcional de correlación e intercambio. Aproximación de la densidad local (LDA) para el potencial de correlación e intercambio. Presentación de las distintas aproximaciones locales para el potencial de correlación que se usan hoy en día. Significado de los autovalores de una partícula. Discusión de los casos límite: tratamiento de los estados excitados.

4. **Limitaciones de LDA:** Fuentes de error. Contribuciones de autocorrelación en LDA, su corrección. Comparación de las autofunciones y autoenergías de una partícula obtenidas usando LDA con resultados Hartree y Hartree-Fock tomando como ejemplo cálculos para clusters metálicos. Comparación de los autovalores LDA con energías de excitación experimentales: gap en semiconductores y aisladores.

UNIDAD II: Aplicaciones

1. **Respuesta lineal y no lineal:** Funciones respuesta. Teoría de perturbaciones estáticas. Screening autoconsistente. Función dieléctrica y anomalía de Kohn. Susceptibilidad de espín en sistemas paramagnéticos y ferromagnéticos.

2. **Otras aplicaciones de la teoría de la funcional densidad a**

gn

sólidos: Modelo esférico, aplicación a metales y sólidos iónicos. Cálculo de la polarizabilidad. Aplicación a cálculos de fonones (frozen phonons). Superficies metálicas, modelo de "Jellium".

Bibliografía:

- 1) "Solid State Physics", N.Ashcroft, N.Mermin, Saunders College Publishing 1976.
- 2) "The density functional formalism, its applications and prospects", R.O. Jones, O. Gunnarsson, Rev of Modern Physics 61, (1989), 689.
- 3) "Density Functional Methods: Theory and Applications", J. Callaway and N.H.March. Solid State Physics, Vol 38.
- 4) "Local density theory of Polarizability", G.Mahan and K.R.Subbaswamy, Plenum 1990.
- 5) "Physics at Surfaces", A. Zangwill, Cambridge University Press, 1988.
- 6) Artículos de revistas especializadas.

Carga horaria de la materia: 4 horas semanales de teoría.
4 horas semanales de prácticos..

Sistema de Promoción: dos exámenes parciales y examen final.

Antoni Llois
A. M. Llois. 