

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

U.B.A

- 1.- DEPARTAMENTO : Física
- 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: 1er. Cuatrimestre 1999.-
- 4.- N° DE CODIGO DE CARRERA:
- 5.- MATERIA. TEMAS AVANZADOS DE MATERIA CONDENSADA: N° DE CODIGO
 SISTEMAS DEBILMENTE CORRELACIONADOS
- 6.- PUNTAJE PROPUESTO : 5(cinco) puntos
- 7.- PLAN DE ESTUDIO : 1987
- 8.- CARACTER DE LA MATERIA: Optativo
- 9.- DURACION: Cuatrimestral
- 10.- HORAS DE CLASES SEMANAL: 8(ocho) hs.
 - a) Teóricas.....4..... hs.
 - b) Problemas.....2..... hs.
 - c) Laboratorio..... hs.
 - d) Seminarios..... hs.
 - e) Teórico-problemas..... hs.
 - f) TRABAJOS TEÓRICOS-prácticas..2..... hs.
 - g) Totales Horas:.....8..... hs.
- 11.- CARGA HORARIA TOTAL:.....hs.
- 12.- ASIGNATURAS CORRELATIVAS:
- 13.- FORMA DE EVALUACION: 2(dos) Exámenes parciales, Examen Final y Monografía
- 14.- PROGRAMA ANALITICO: (Se adjunta)
- 15.- BIBLIOGRAFIA: (Se adjunta)

FECHA: 27 MAY 1999

FIRMA PROFESOR:

[Handwritten Signature]

FIRMA DIRECTOR:

Dr. JUAN PABLO PAZ
DIRECTOR
DEPARTAMENTO DE FISICA

ACLARACION FIRMA: Dra. Ana María Llois

Año 1999

Materia de Doctorado

Temas avanzados de Materia Condensada: Sistemas débilmente correlacionados

1- La aproximación de electrón independiente:

La ecuación de Schrödinger. Principio variacional para el estado fundamental. Métodos de cálculo aproximados: La aproximación de Hartree-Fock. Gas de electrones homogéneo. Potencial de intercambio local. Teorema de Koopman. Energía de correlación: cálculos variacionales (interacción de configuraciones) y perturbativos. Densidad electrónica. Limitaciones de la aproximación de un electrón.

2- Teoría de la funcional de la densidad: desarrollo histórico.

La idea original: Modelo de Thomas Fermi. Representabilidad de la densidad electrónica. Teoremas de Hohenberg y Kohn. La formulación de Levy. Modelos de Thomas Fermi y otros relacionados Modelos tradicionales de TF y TFD. Implementación. La aproximación local. Corrección de gradiente convencional. Modelo de Thomas-Fermi-Dirac-Weizsaecker

3- Teoría de la funcional de la densidad: implementación de Kohn y Sham.

Orbitales y ecuaciones de Kohn-Sham. Solución de las ecuaciones de Kohn-Sham. Autoconsistencia. Densidad local y aproximación $X\alpha$. Relación con las ecuaciones de Hartree-Fock. Correcciones de auto-interacción. Funcional de intercambio y correlación y agujero de intercambio y correlación. Sistemas espín-polarizados

4- Métodos de cálculo DFT en sólidos:

Breve racconto sobre métodos de pseudopotenciales, método de ondas planas aumentadas (APW), métodos linealizados: LMTO y LAPW. Base LAPW y sus propiedades. Representación de la densidad de carga y del potencial. Funciones LAPW, construcción. Funciones radiales relativistas. El método de los tetraedros. Densidad en la zona intersticial y en las esferas. Orbitales locales. Cálculo de fuerzas. Aplicaciones: Magnetismo en sistemas de metales de transición, efecto de la baja dimensionalidad, Magnetorresistencia gigante, anisotropía magnética. Superconductores de alta T_c : bandas en el estado normal. Caso límite: compuestos de Ce.

5- Métodos de cálculo DFT en moléculas y nanoagregados:

Bases localizadas de tipo numérico y de tipo analítico. Funciones de base de tipo Gaussiano. Técnicas de integración para el cálculo de energías. Implementaciones computacionales. Métodos híbridos DFT-Hartree-Fock. Aplicaciones: cálculo de fuerzas, optimización de

APROBADO POR RESOLUCIÓN CD 920/99

estructuras y dinámica molecular. Modos normales. Propiedades de respuesta eléctrica. Densidad de carga y reactividad. Predicción de energías de ligadura y energías de reacción. Influencia de la elección del funcional: funcionales LDA y GGA. Comparación de la performance de DFT comparada con otros metodos ab-initio. Aplicaciones a sistemas biológicos: DNA y procesos en solución acuosa

Bibliografía:

1. Parr y W. Yang, *Density Functional Theory of Atoms and Molecules*, Oxford University Press, New York (1990).
2. Peter Fulde, *Electron correlations in Molecules and Solids*, Springer(1995)
3. Kryachko y E. V. Ludeña, *Energy Density Functional Theory of Many Electron Systems*, Kluwer Academic Publishers (1991).
4. Labanowski and J. Andzelm, eds. *Density Functional Methods in Chemistry*, Springer, New York (1991).
5. Estrin, G. Corongiu, y E. Clementi, *Structure and Dynamics of Molecular Systems with Density Functional Theory*, in *Methods and Techniques in Computational Chemistry*, Capítulo 12, E. Clementi editor, STEF, Cagliari (1994).
6. J.A.C Bland and B. Heinrich (eds) *Ultrathin magnetic Structures I an II: An Introduction to the electronic and Structural Properties*, Springer; (1994)
- 7- P.Fulde, *Electron Correlations in Molecules and Solids*, Springer (1995)..
- 8- Artículos de revistas del area.

Carga horaria: cuatro horas semanales de teoría y cuatro horas semanales entre prácticos y sesiones de laboratorio computacional..

Sistema de promoción: dos exámenes parciales y un final y entrega de monografía.



Dra Ana María Llois