

**Título:** Cálculo de propiedades magnéticas a partir de la teoría de la funcional de la densidad.

**Programa tentativo:**

• **Día 1:**

○ **Introducción a la teoría de la funcional de la densidad (density functional theory; DFT).**

- Los teoremas de Hohenberg-Kohn y Kohn-Sham.
- Extensiones: Spin y dependencia temporal. Aproximaciones más comúnmente utilizadas, desde la aproximación de densidad local (LDA), gradiente generalizado (GGA), meta-GGA, y funcionales híbridas.

○ **Implementaciones prácticas de DFT.**

- Bases localizadas y ondas planas.
- Potenciales efectivos.
- Ecuaciones auto-consistentes: Técnicas y estrategias de convergencia.
- DFT en práctica. Desempeño típico para propiedades generales de moléculas y sólidos.
- Estrategias para evaluar el desempeño de DFT: Condiciones exactas y validación empírica.

• **Día 2:**

○ **DFT para sistemas magnéticos.**

- Spin DFT y Spin DFT no colineal.
- Estados y simetría de spin en DFT. DFT con campo magnético externo.
- Aproximaciones para sistemas con electrones desapareados.
- Contaminación de spin.
- Efectos relativistas a partir de la ecuación de Dirac: efectos escalares y spin-orbita.
- La transformación de Douglass-Kroll-Hess y otras aproximaciones quasi-relativistas.

○ **Teoría de respuesta.**

- Propiedades electrónicas a partir de derivadas de la energía electrónica.
- Conexión entre perturbaciones externas y propiedades.
- Relación entre restricciones formales y respuesta.
- Ejemplos: Propiedades y excitaciones. Métodos de respuesta lineal en DFT.

- **Día 3:**

- **Cálculo de propiedades magnéticas a partir de DFT I.**
  - Sistemas de capa cerrada.
  - Magnetismo orbital en DFT.
  - Parámetros de resonancia magnética nuclear (NMR): Acoplamientos magnéticos entre spines nucleares y apantallamiento nuclear.
  - Susceptibilidad magnética orbital.
  - Interacción Spin-orbita.
  - Ejemplos: Desempeño típico de DFT para propiedades de NMR.

- **Día 4:**

- **Cálculo de propiedades magnéticas a partir de DFT II.**
  - Sistemas de capa abierta.
  - El modelo de Heisenberg-Dirac-van Vleck (HDVV).
  - Relación entre experimentos y estructura electrónica.
  - Determinación de parámetros en el Hamiltoniano efectivo de HDVV a partir de DFT: Constantes de acoplamiento de intercambio magnético y anisotropía magnética.
  - El tensor  $g$ .
  - Ejemplos: Imanes moleculares y complejos con metales de transición.
  - Desempeño típico de DFT para parámetros magnéticos.

- **Día 5: Resumen, discusión, conclusiones y examen.**

- **Bibliografía:**

- "Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods", Richard Martin (Cambridge University Press, 2004).
- "Introduction to Computational Chemistry", Frank Jensen (Wiley, Second Edition, 2007).
- Ab Initio Methods for the Calculation of NMR Shielding and Indirect Spin-Spin Coupling Constants, T. Helgaker, M. Jaszunski, and K. Ruud, Chem. Rev. 99, 293-352 (1999).
- Density Functional Studies of Molecular Magnets, A. V. Postnikov, J. Kortus, and M. R. Pederson, phys. stat. sol. (b) 243, 2533-2572 (2006).

**Número de horas del curso:** El curso está diseñado para aproximadamente 25 horas (5 días de 5 horas cada uno).

**Fecha tentativa de la visita:** La fecha tentativa es fines de mayo/principios de junio del 2017.



Universidad de Buenos Aires  
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Referencia Expediente. 507.164/17

Buenos Aires, 10 ABR 2017

VISTO:

la nota presentada por el Dr. Fernando C. Lombardo, Director del Departamento de Física, en la que se eleva información y el programa del curso de posgrado **CÁLCULO DE PROPIEDADES MAGNÉTICAS A PARTIR DE LA TEORÍA DE LA FUNCIONAL DE DENSIDAD**, que será dictado en el segundo cuatrimestre de 2017 por los Dres. Juan Peralta y Marta Ferraro,

CONSIDERANDO:

lo actuado en la Comisión de Doctorado

lo actuado en la Comisión de Posgrado,

lo actuado por este cuerpo en Sesión Ordinaria realizada en el día de la fecha,

en uso de las atribuciones que le confiere el Artículo N° 113 del Estatuto Universitario,

EL CONSEJO DIRECTIVO DE LA FACULTAD DE  
CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES  
RESUELVE

Artículo 1º: Autorizar el dictado del curso de posgrado **CÁLCULO DE PROPIEDADES MAGNÉTICAS A PARTIR DE LA TEORÍA DE LA FUNCIONAL DE DENSIDAD** de 25 hs de duración.

Artículo 2º: Aprobar el programa del curso de posgrado **CÁLCULO DE PROPIEDADES MAGNÉTICAS A PARTIR DE LA TEORÍA DE LA FUNCIONAL DE DENSIDAD** obrante a fs. 4 y 5 del expediente de la referencia.

Artículo 3º: Aprobar un puntaje máximo de uno y medio (1,5) puntos para la Carrera del Doctorado.

Artículo 4º: Comuníquese a la Biblioteca de la FCEyN, con fotocopia del programa incluida.

Artículo 5º: Comuníquese a la Dirección de Alumnos, a la Dirección del Departamento de Física y a la Secretaría de Posgrado. Cumplido, archívese.

RESOLUCION CD N° 0612  
SP/qa/03/04/2017

Dr. OSCAR G. PARRAGUIRE  
CARRERA DE POSGRADO  
FCEyN - UBA

Dr. JUAN CARLOS REBOREDA  
DECANO