

QI 2000
④

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

DEPARTAMENTO: QUIMICA INORGANICA, ANALITICA Y QUIMICA FISICA

CARRERA: Curso de Postgrado-Doctorado

ORIENTACION: ----

CUATRIMESTRE: Segundo

AÑO: 2000

CODIGO DE CARRERA: 51

MATERIA: *New Trends in Electronic Structure Calculations* CODIGO: Nuevo

PUNTAJE: 2 (dos)

PLAN DE ESTUDIO: ----

CARACTER DE LA MATERIA: ----

DURACION: 12 al 20 de Diciembre de 2000

HORAS DE CLASE SEMANAL:

Teóricas: 10 horas

Problemas: 10 horas

Laboratorio: 10 horas

TOTAL: 30 horas

CARGA HORARIA TOTAL: 30 hs.

ASIGNATURAS CORRELATIVAS: Licenciatura en Ciencias Químicas.
Licenciatura en Ciencias Físicas.

FORMA DE EVALUACION: Examen final.

PROGRAMA ANALITICO:

1. Introduction and State-of-the-art.

Brief review of density functional theory (DFT), local gas density (LDA) and generalized gradient approximations (GGA).

2. New trends in exchange and Correlation Functionals

a. Meta-GGA.

b. The local Airy gas.

P. Aramendia
Dr. PEDRO ARAMENDIA
DIRECTOR
DEPTO. QCA. INORG. ANAL. QCA. FIS.



FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES
UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física

Buenos Aires, Marzo 1° de 2001

Señor Secretario Académico
de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales
Dr. Jesús M. Gardiol
S / D

Tengo el agrado de dirigirme al señor Secretario Académico a efectos de comunicarle el desarrollo del curso de post-grado y/o doctorado que se dictará en este Departamento durante el 2° cuatrimestre de 2001.

- 1- Denominación del Curso: *New Trends in Electronic Structure Calculations*
- 1a- Carácter del Curso: *Postgrado*
(para Doctorado: ampliar conocimientos, actualización, extensión profesional)
- 2- Fecha de iniciación: *12 de Diciembre de 2000*
- 3- A dictarse en: *Depto. de Qca. Inorgánica, Analítica y Qca. Física*
- 4- Responsable (s): *Dr. Darío Estrín (DQIAyQF) y Dr. Jorge Kohanoff.*
(si no revistan en la Facultad, adjuntar nota solicitando la autorización pertinente, la que comprenderá el dictado del Curso y la firma de las Actas de Examen pertinentes).
(Además agregar curriculum vitae resumido, debidamente firmado por el Director de Departamento o por el interesado).
- 5- Cantidad de horas semanales: *30 horas*
- 5a- Nro. de horas semanales de clases teóricas: *10 horas*
- 5b- Nro. de horas semanales de clases de problemas: *10 horas*
- 5c- Nro. de horas semanales de trabajos prácticos: *10 horas*
- 6- Condiciones de ingreso: *Licenciados en Cs. Químicas y Cs. Físicas*
- 7- Nro. de alumnos (mínimo y máximo): -----
- 8- Forma de evaluación: *Examen final.*
- 8a- Certificado de aprobación: *SI-NO* (tachar lo que no corresponda)
- 9- Puntaje propuesto de acuerdo con el carácter del curso: *2 (dos)*
- 10- Nro. de código: *Nuevo*
- 11- Se acompaña despacho de la Sub-Comisión Departamental con V°.B°. del Director de Departamento.
- 12- Se propone un arancel de ...20.....módulos, teniendo en cuenta como base el valor de \$(el que rija en ese momento).


Dr. PEDRO ARAMENDIA
DIRECTOR
DEPTO. QCA. INORG. ANAL. QCA. FIS.

- c. Optimized effective potential – exact exchange.
3. Excited states in DFT
- a. Time-dependent Density Functional Theory
 - b. Many-body Perturbation Theory (GW)
4. Quantum nuclei
- a. Path integrals
 - b. Multicomponent
 - c. Beyond Born-Oppenheimer.
5. Methods for Electronic Structure Calculations
- a. All-electron vs. Pseudopotential Methods
 - b. Pseudopotential codes.
 - i. Plane waves (Car-Parrinello molecular dynamics, FEMD, Castep).
 - ii. Localized basic sets (Program Siesta)



Firma Profesor

DARIO A. ESTRIN

Aclaración



Firma Director

Dr. PEDRO ARAMENDIA
DIRECTOR
DEPTO. QCA. INORG. ANAL. QCA. FIS.

Aclaración