

MÉTODOS MECANOCUÁNTICOS BASADOS EN LA TEORÍA DEL FUNCIONAL DE LA DENSIDAD ELECTRÓNICA. APLICACIONES A SISTEMAS NANOESTRUCTURADOS

LUNES POR LA MAÑANA

1. Introducción. Dr. E. Leiva

Series de Fourier y sus extensiones. Desarrollo de Fourier en una dimensión. Integral de Fourier. Generalización de la expansión de Fourier. Redes de Bravais- Redes recíprocas. Repaso de álgebra lineal: Álgebra vectorial en 3 dimensiones, Espacios vectoriales N-dimensionales, Cambio de base.

Funciones de matrices. Funciones ortogonales, autofunciones y operadores. Cálculo variacional. El método variacional en la mecánica cuántica.

Introducción al cálculo de variaciones. Un lema básico.

La ecuación de Euler-Lagrange. Caso de varias variables dependientes. Caso de varias variables dependientes. El problema variacional lineal. (3 horas)

2. Modelo de Thomas Fermi. Dr. E. Leiva

Modelo de Thomas Fermi. Principio del mínimo de energía y potencial químico. Ecuaciones de Hartree. Ecuaciones de Hartree-Fock. Energía de intercambio y energía de correlación. La aproximación de Born-Oppenheimer. (1 hora)

LUNES POR LA TARDE

3. Teoría del funcional de la densidad electrónica. Dr. M. Zoloff Michoff

Teoremas de Hohenberg y Kohn. Ecuaciones de Kohn-Sham (2 horas)

4. Energía de correlación e intercambio en DFT. Dr. G. Soldano

Naturaleza de la energía de correlación e intercambio. Definiciones. El hueco de correlación e intercambio. La integral de acoplamiento. Propiedades formales de los funcionales. Funcionales de correlación e intercambio. La aproximación de densidad local, La aproximación generalizada de gradientes. Funcionales que dependen de los orbitales. Intercambio exacto. Funcionales Híbridos. La discontinuidad del potencial químico (2 horas)

MARTES POR LA MAÑANA

5. Sistemas periódicos. Dr. M. Zoloff Michoff

Teorema de Bloch. Primera prueba del Teorema de Bloch. Condiciones de Born-von Karman. La zona de Brillouin, Sistemas periódicos y ondas planas, sistemas periódicos y bases localizadas, Integración de funciones sobre la primera zona. (1 hora)

6. Pseudopotenciales. Dra M. Rojas

Aproximación de carozo congelado. Pseudopotenciales que conservan la norma. Construcción de pseudopotenciales, la receta de Troullier y Martins, forma separable de Kleinman y Bylander, estados fantasma, estimación de propiedades de transferibilidad a partir de cálculos atómicos. (1 hora)

7. Programa SIESTA. Dra M. Rojas

Bases localizadas de soporte finito, construcción de las bases, funciones de polarización, radios de corte y energía de confinamiento, Integrales sobre grillas en el espacio real. (1 hora)

MIÉRCOLES POR LA MAÑANA

8. Paquete de programas QUANTUM ESPRESSO. Dra. P. Paredes Olivera

QUANTUM ESPRESSO como una distribución de programas. Programa de cálculo PWSCF: uso de pseudopotenciales y ondas planas para la formulación de las ecuaciones de Kohn-Sham. Integración en el espacio recíproco y técnicas especiales de muestreo. Uso de la técnica de transformadas de Fourier rápidas. (2 horas)

9. Teoría del funcional de la densidad dependiente del tiempo. Dra. Ma. Belén Oviedo

Teorema de Runge-Gross. Teoría de respuesta lineal. Cálculo de excitaciones electrónicas. Integración explícita de la dinámica en el tiempo. Aproximaciones adiabáticas del funcional de correlación e intercambio. Dinámica no adiabática. (2 horas)

10. Desarrollo reciente de nuevos funcionales de correlación e intercambio: Teoría y aplicaciones. Dr. M. Zoloff Michoff

Estado actual y perspectivas futuras acerca del desarrollo de nuevos funcionales de correlación e intercambio semi-locales e híbridos. Formulación teórica, mejoras obtenidas en cuanto a exactitud y eficiencia computacional en aplicaciones de interés actual. Desarrollo de funcionales semilocales y no locales, incluyendo métodos RPA (random phase approximation) y funcionales híbridos basados en RPA. Desarrollo de métodos para la corrección de interacciones de van de Waals de largo alcance. Desarrollo de funcionales para cálculos relativistas. (1 hora)

JUEVES POR LA MAÑANA

11. Programa Gaussian. Dra. Ma. Belén Oviedo

Introducción al programa Gaussian. Optimización de geometría. Cálculo de la densidad de estados. Cálculo de espectros de absorción con TD-DFT en el régimen lineal. (1 hora)

12. Introducción a dinámica molecular *ab-initio*. Dr. F. Soria

Conceptos generales de dinámica molecular Born–Oppenheimer y dinámica molecular de Car-Parinello. Ventajas y desventajas de cada técnica. Aplicaciones. (2 horas)

13. Termodinámica *ab-initio*. Dr. G. Soldano

Introducción. El problema de las comparaciones energéticas para sistemas de distintos tipos y cantidades de átomos. Potenciales termodinámicos. Repaso de termodinámica estadística. Termodinámica *ab-initio*. Aproximaciones. Diagramas de fases. Aplicaciones. Conclusiones. (1 hora)

VIERNES POR LA MAÑANA

14. Aplicaciones

- a) **Estudio de la reactividad superficial. Enlace químico superficial.** Dra. P. Paredes Olivera
Estudio de mecanismos de reacción utilizando el método de la banda elástica en sistemas simulados aplicando condiciones periódicas de contorno. (1 hora).
- b) **Superficies carbonosas modificadas con aplicación a biosensores.** Dra. M. Rojas
Estudio termodinámico y cinético de la reacción de reducción de peróxido de hidrógeno (HPRR) en la interfase de HOPG/g-C₃N₄/agua. Se estudiaron diferentes mecanismos para explicar el cambio observado en la cinética de la HPRR con la concentración del analito en solución. (1 hora).
- c) **Baterías de ion-Litio.** Dra. G. Luque
Se presentarán resultados de superficies de carbono modificadas con silicio y su interacción con iones litio para la aplicación como ánodos de baterías de ion-litio. (1 hora).
- d) **Interacción de polisulfuros con estructuras de grafeno funcionalizadas.** Dr. G. Lenner
Interfases y reacciones de interés en baterías y remediadores ambientales. (1 hora)

VIERNES POR LA TARDE

15 Ajuste de potenciales semiempíricos con cálculos DFT. Dr. M. Mariscal

Ajuste de potenciales semiempíricos para el estudio de la adsorción de especies moleculares sobre metales con cálculos DFT (2 horas)

PROGRAMA DE T. PRÁCTICOS

Se realizarán clases prácticas en el gabinete de computación aplicando las técnicas de cálculo expuestas.

MARTES POR LA TARDE (5 hs): CÁLCULO DE PROPIEDADES COHESIVAS Y ELECTRÓNICAS DE SISTEMAS REALES CON PERIODICIDAD EN EL ESPACIO TRIDIMENSIONAL. (Dr. G. Lener, Dr. M. Zoloff Michoff)

Estudio de una reacción catalizada por una superficie metálica con SIESTA

- A) Tarjeta de entrada para el SIESTA: formato y principales “*keywords*”.
- B) Herramientas del programa SIESTA. Cálculos de moléculas aisladas. Parámetros de convergencia. Optimización de geometría utilizando gradientes conjugados y dinámicas de Born-Oppenheimer. Comparación de resultados teóricos con datos experimentales. Cálculos de un metal masivo empleando condiciones periódicas de contorno en tres dimensiones. Determinación de parámetros estructurales. Muestreo del espacio recíproco. Cálculos de una superficie: orbitales difusos, energía superficial. Propiedades de transporte, estructura electrónica y vibracional.

MIÉRCOLES POR LA TARDE (5 hs): DISEÑO Y OPTIMIZACIÓN DE SISTEMAS CON CONDICIONES PERIÓDICAS DE CONTORNO. Dr. F. Soria, Dr. L. Farigliano, Dr. G. Soldano

- A) Cálculo de propiedades estructurales, tales como parámetro de red, distancia interatómica, bulk modulus, compresibilidad, de un sólido cristalino en función de diferentes parámetros tales como pseudopotenciales, número de ondas planas y muestreo en el espacio recíproco.
- B) Cálculo y comparación de estructuras de bandas y gráficos de densidad de total de estados y densidad proyectada en sistemas metálicos, semiconductores y aislantes. Obtención del valor del band gap. Realización de correcciones en las estructuras de bandas usando el método LDA+U.

JUEVES POR LA TARDE (5 hs) REACTIVIDAD SUPERFICIAL. CONSTRUCCIÓN Y OPTIMIZACIÓN DE SISTEMAS ADSORBATO-SUSTRATO. Dr. F. Soria, Dr. L. Farigliano, Dr. G. Soldano, Dra. L. Tobón

- A) Construcción y optimización de las geometrías de una molécula adsorbida sobre una superficie. Uso mixto de coordenadas cartesianas y coordenadas internas. Determinación de la energía de adsorción. Análisis del enlace: densidad de estados, densidad electrónica diferencial,
- B) Estudio de una reacción sobre una superficie. Construcción y optimización de geometrías adecuadas para los productos. Búsqueda del camino de reacción utilizando el método de la banda elástica (NEB).