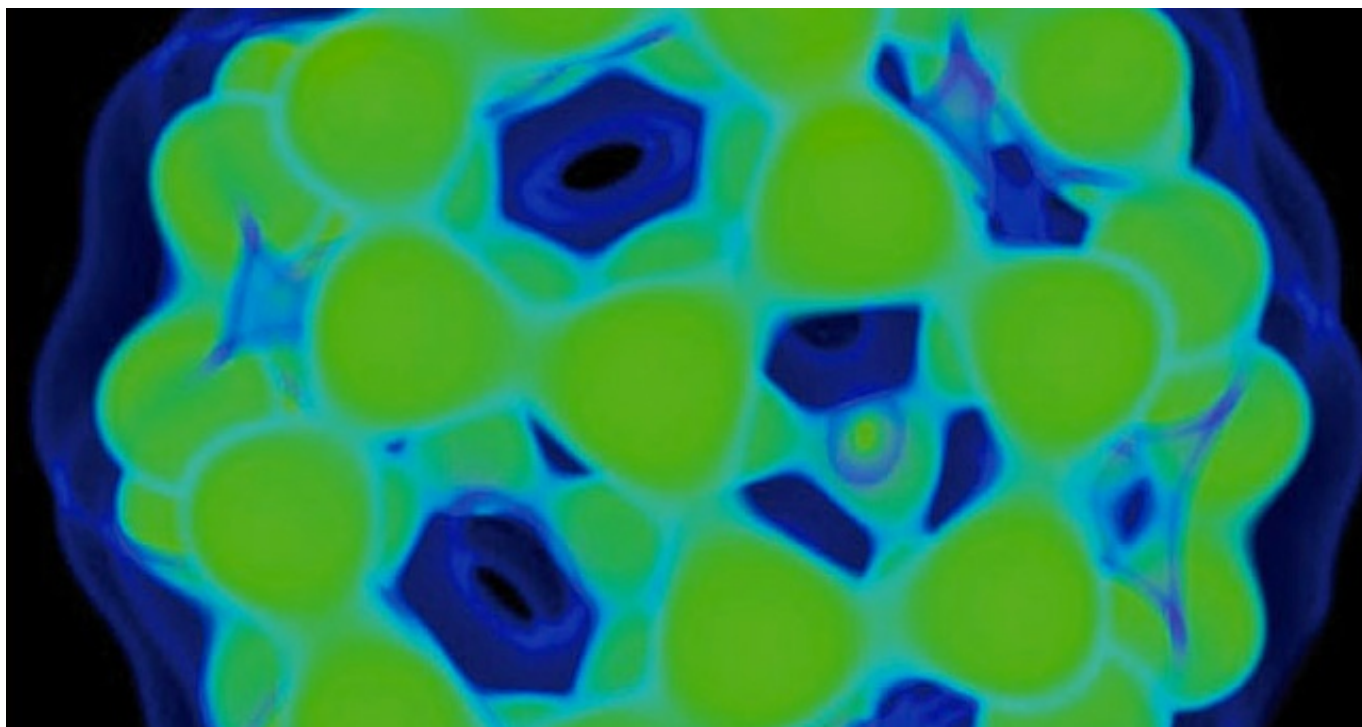


Curso “Métodos mecanocuánticos basados en la teoría del funcional de la densidad electrónica...”



Curso “Métodos mecanocuánticos basados en la teoría del funcional de la densidad electrónica. Aplicaciones a sistemas nanoestructurados.”

Aprobado según Resolución HCD 261/14

Del 28 de julio al 1 de agosto de 2014. Horario de cursado: de 9 a 13.30 hs. y de 15 a 19 hs.
Lugar: Auditorio FCQ y Lab. Computación, Av. Haya de la Torre y Medina Allende. Ciudad Universitaria, Córdoba. Organiza: Departamento de Matemática y Física de la FCQ (UNC).

Dirigido a:

Estudiantes de doctorado que tienen interés en manejar técnicas de cálculo a partir de primeros principios aplicables a sistemas moleculares y de la materia condensada.

Objetivos:

Dar las bases teóricas y prácticas para realizar cálculos computacionales a partir de primeros principios, dentro de la teoría del funcional de la densidad electrónica, discutiendo algunas aplicaciones concretas en sistemas nanoestructurados.

Plantel docente:

-Director:

Dr. Ezequiel Leiva

-**Colaboradores:** Dra. Gabriela Borosky, Dra. Guillermina Luque, Dr. Marcelo Mariscal, Dra. Patricia Paredes, Dra. Mariana Rojas, Dr. Cristián G. Sánchez, Dr. Germán Soldano y Dr. Patricio Vélez.

Modalidad: presencial

Aranceles:

\$440. Incluye certificado.

Inscripciones

Hasta el 28 de julio de 2014 en Secretaría Administrativa de la Escuela de Posgrado, Edificio Integrador de la Facultad de Ciencias Químicas (UNC), Ciudad Universitaria, Córdoba. Horario: lunes a jueves de 10 a 12 hs.
E-mail: epdaher@fcq.unc.edu.ar

Más datos:

Secretaría Administrativa del Departamento de Matemática y Física (FCQ, UNC)
E-mail: unimat@fcq.unc.edu.ar

PROGRAMA

CONTENIDOS TEÓRICOS

1. Introducción.

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: Algebra 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 independientes. El problema variacional lineal.

2. Modelo de Thomas Fermi

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.

3. Teoría del funcional de la densidad electrónica

Teoremas de Hohenberg y Kohn. Ecuaciones de Kohn-Sham.

4. Energía de correlación e intercambio en DFT

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. El modelo de Jellium.

5. Sistemas periódicos.

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.

6. Pseudopotenciales

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

7. Programa SIESTA.

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.

8. Paquete de programas QUANTUM ESPRESSO

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.

9- Teoría del funcional de la densidad dependiente del tiempo.

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. Teoría del funcional de la densidad de corriente. Dinámica no adiabáticas.

Aplicaciones en el estudio de la reactividad superficial.

10- Paquete de programas Gaussian

Introducción al programa Gaussian. Cálculos de energía. Optimización de geometría. Análisis termoquímico y de frecuencia- Cálculo de caminos de reacción.

11- Cálculos DFT con el programa Materials Studio

12. Aplicaciones a sistemas nanoestructurados

12.1 Aplicaciones a superficies carbonadas funcionalizadas con grupos orgánicos

Sistemas de interés en biosensores donde se reduce u oxida peróxido de hidrógeno. Se investiga el cambio de las propiedades catalíticas del film en presencia de defectos superficiales, de borde y funcionalización.

12.2Aplicaciones a Almacenamiento de Hidrógeno en materiales carbonosos y Baterías de ion-Litio

Superficies carbonadas adecuadas para el almacenamiento de hidrógeno. Se considera el aumento de capacidad para el almacenamiento del mismo mediante el decorado con metales de transición

Se consideran diferentes materiales para el almacenamiento de iones-litio.

12.3 Estudios de estabilidad de alambres moleculares.

Se consideran las propiedades de alambres moleculares formados por metales y moléculas intercaladas, de interés en circuitos electrónicos

12.4Aplicaciones en el estudio de la reactividad superficial.

Estudio de mecanismos de reacción utilizando el método de la banda elástica, en sistemas simulados aplicando condiciones periódicas de contorno. Estadios iniciales de la adsorción metálica sobre superficies de silicio. Reactividad de superficies de silicio modificadas. Adsorción de tioles sobre superficies metálicas.

12.5. Aplicaciones en Química Orgánica y Biomolecular

Estudios aplicados a compuestos orgánicos y biomoléculas. Relaciones estructura-reactividad, actividad biológica

12.6 Ajuste de potenciales semiempíricos con cálculos DFT.

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

PRÁCTICOS

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

expuestas.

Lista de Prácticos:

CALCULO DE PROPIEDADES COHESIVAS Y ELECTRONICAS DE SISTEMAS REALES CON PERIODICIDAD EN EL ESPACIO TRIDIMENSIONAL

1-Estudio de una reacción catalizada por una superficie metálica con SIESTA

- A. Construcción y prueba de pseudopotenciales utilizando el programa ATOM. Inclusión de “core-corrections” para metales de transición. Tarjeta de entrada para el SIESTA: formato y principales “keywords”. Bases atómicas numéricas, construcción automática y optimización variacional empleando el algoritmo simplex.
- B. Cálculos de moléculas aisladas. Parámetros de convergencia. Optimización de geometría utilizando gradientes conjugados. 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.
- C. 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. Error por superposición de bases. Análisis del enlace: densidad de estados, densidad electrónica diferencial, cargas de Mulliken.
- D. 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).

2-Cálculo de propiedades estructurales, tales como parámetro de red, distancia interatómica, bulkmodulus, compresibilidad, de un sólido cristalino en función de diferentes parámetros tales como pseudopotenciales, numero de ondas planas y muestreo en el espacio recíproco.

3-Cálculo y comparación de estructuras de bandas y gráficos de densidad de estados total y proyectadas 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.