



Universidad Nacional de San Luis
Rectorado

"2015 - Año del Bicentenario del Congreso de los Pueblos Libres"

ES COPIA
OSCAR GUILLERMO SEGURA
Director de Despacho
UNSL

SAN LUIS, 20 ABR 2015

VISTO:

El Expediente EXP-USL: 2504/2015 mediante el cual se solicita la protocolización del Curso de Posgrado: **TEORÍA DEL FUNCIONAL DE DENSIDAD – FUNDAMENTOS Y METODOLOGÍA**; y

CONSIDERANDO:

Que el Curso de Posgrado se propone dictar en el ámbito de la Facultad de Ciencias Físico Matemáticas y Naturales del 7 al 14 de abril de 2015, con un crédito horario de 20 horas presenciales y bajo la coordinación del Dr. Karim SAPAG.

Que la Comisión Asesora de Posgrado de la Facultad de Ciencias Físico Matemáticas y Naturales recomienda aprobar el curso de referencia.

Que el Consejo de Posgrado de la Universidad Nacional de San Luis en su reunión del 7 de abril de 2015, analizó la propuesta y observa que el programa del curso, bibliografía, metodología de evaluación y docentes a cargo, constituyen una propuesta de formación de posgrado de calidad en su campo específico de estudio.

Que, por lo expuesto, el Consejo de Posgrado aprueba la propuesta como Curso de Posgrado, según lo establecido en Ordenanza CS N° 23/09.

Que corresponde su protocolización.

Por ello y en uso de sus atribuciones

EL RECTOR DE LA UNIVERSIDAD NACIONAL DE SAN LUIS

RESUELVE:

ARTÍCULO 1°.- Protocolizar el dictado del Curso de Posgrado: **TEORÍA DEL FUNCIONAL DE DENSIDAD – FUNDAMENTOS Y METODOLOGÍA**, en el ámbito de la Facultad de Ciencias Físico Matemáticas y Naturales del 7 al 14 de abril de 2015, con un crédito horario de 20 horas presenciales.

ARTÍCULO 2°.- Protocolizar el cuerpo docente constituido por: Responsable: Dr. Hélio DUARTE (Pas. FK778392) de la Universidade Federal de Minas Gerais, Dr. Daniel LINARES (DNI N° 16.635.982), Auxiliar: Mag. Sebastián AMAYA RONCANCIO (DNI N° 94.927.661) ambos de esta Casa de Altos Estudios.

Cpde RESOLUCIÓN R N° **465**

Dr. Felix D. Nieto Quintas
Rector
U.N.S.L.

Dra. Alicia Marzona
Secretaria de Posgrado
U.N.S.L.



Universidad Nacional de San Luis
Rectorado

"2015 - Año del Bicentenario del Congreso de los Pueblos Libres"

ES COPIA
OSCAR GUILLERMO SEGURA
Director de Despacho
UNSL

ARTÍCULO 3°.- Aprobar el programa del Curso de referencia, de acuerdo al ANEXO de la presente disposición.-

ARTÍCULO 4°.- Comuníquese, insértese en el Libro de Resoluciones, publíquese en el Digesto Electrónico de la UNSL y archívese.-

RESOLUCIÓN R N° 465
may

Dra. Alicia Marcela Príncipe
Secretaria de Posgrado
U.N.S.L.

Dr. Félix B. Nieto Quintas
Rector
U.N.S.L.



Universidad Nacional de San Luis
Rectorado

"2015 - Año del Bicentenario del Congreso de los Pueblos Libres"

ES COPIA
JOSÉ GUILLERMO SEGURA
Director de Despacho
UNSL

ANEXO

**DENOMINACIÓN DEL CURSO: TEORÍA DEL FUNCIONAL DE DENSIDAD –
FUNDAMENTOS Y METODOLOGÍA**

UNIDAD ACADÉMICA RESPONSABLE: Facultad de Ciencias Físico Matemáticas
y Naturales

CATEGORIZACIÓN: Perfeccionamiento

RESPONSABLE: Dr. Hélio DUARTE

CORRESPONSABLE: Dr. Daniel LINARES

AUXILIAR: Mag. Sebastián AMAYA RONCANCIO

COORDINADOR: Dr. Karim SAPAG

CRÉDITO HORARIO: 20 horas

MODALIDAD DE DICTADO: Presencial

FECHA DE DICTADO DEL CURSO: 7 al 14 de abril de 2015

FECHA PREVISTA PARA ELEVAR LA NÓMINA DE ALUMNOS

APROBADOS: Diciembre de 2015

DESTINATARIOS: Egresados con título de grado universitario en Física, Química,
Ingeniería Química, en Petróleo, en Materiales y en disciplinas afines a la temática del
curso.

LUGAR DE DICTADO: Dpto. de Física – Ejército de los Andes 950 – San Luis

CUPO: 15 personas.

FUNDAMENTACIÓN: Se presentarán algunos conceptos básicos e históricos basados
en la Teoría de Thomas-Fermi-Dirac. Se discutirán los teoremas de Hohenberg-Kohn,
las ecuaciones de Kohn-Sham y su interpretación a la luz de la Búsqueda Restringida de
Levy. La metodología generalmente implementada en los principales programas
computacionales disponibles en la bibliografía, que utiliza el conjunto de funciones de
base localizadas, será presentada en detalle. Un tópico especial sobre los funcionales de
intercambio-correlación y cómo ellos son desarrollados será también presentado. En la
parte práctica, se pretende estimular a los estudiantes a definir correctamente los datos
de entrada, prestando atención a algunos aspectos de definición del modelo químico y la
utilización de "palabras-clave" que ayudan en la convergencia del cálculo SCF y en la
rapidez del cálculo. Se espera que el estudiante al final del curso comprenda los
principales conceptos involucrados en la DFT, se encuentre familiarizado con los
términos y sea capaz de profundizar en el tema. Durante los seminarios, hablaremos de
las aplicaciones de la DFT en sistemas de interés científico y tecnológico.

Dr. Fernando Quintas
Rector
U.N.S.L.

Dra. María Marcela Printista
Secretaría de Posgrado
U.N.S.L.

Cpde RESOLUCIÓN R N° 465



Universidad Nacional de San Luis
Rectorado

"2015 - Año del Bicentenario del Congreso de los Pueblos Libres"

ES COPIA
OSCAR GUILLERMO SEGURA
Director de Despacho
UNSL

OBJETIVOS: Explicar las bases de la Teoría del Funcional de Densidad Moderna, sus fundamentos y las metodologías que permiten su implementación en programas computacionales.

CONTENIDOS MÍNIMOS:

- Modelos de Thomas-Fermi-Dirac
- Teoremas de Hohenberg e Kohn
- Ecuaciones de Kohn-Sham
- Funcionales de Intercambio-Correlación.
- Conjuntos de Funciones de base localizadas.
- Ejemplos de Aplicaciones.

PROGRAMA:

- Formalismo:
 1. Modelos elementales de un gas de electrones. Teoría de Drude y Sommerfeld.
 2. Métodos de Thomas-Fermi, Thomas-Fermi-Dirac.
 3. Término de Cambio de Slater - Método de X^{\square} .
 - Agujero de Fermi.
 - Significado de los auto-valores $\varepsilon_i = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial n_i}$
 4. Teoría del Funcional de Densidad
 - Teoremas de Hohenberg y Kohn
 - Formalismo de Levy - "Constrained Search"
 - Índices de Reactividad: Dureza, Blandura y función de Fukui
 - Método de Kohn-Sham
 5. Funcionales de Intercambio-Correlación
 - Matrices de Densidad y Funciones de Correlación de pares
 - Aproximación Local: LDA, LSDA
 - Funcionales no-locales
 - "Coordinate Scaling"
 - Método de la "Conexión Adiabática"
- Metodología
 1. Solución de las Ecuaciones de Kohn-Sham
 2. Métodos Disponibles
 - "Linear Combination of Gaussian Type Orbitals" - LCGTO
 - Bases Numéricas
 - Solución Numérica
 3. Aspectos Técnicos de la Aproximación LCGTO
 - Bases orbitales
 - Bases auxiliares
 - Mallas, "Grids"
 - Pseudopotenciales.
 - Algoritmos de optimización, estados de transición
 - Aceleración de convergencia

Dr. Felice Augusto Quintas
Rector
U.N.S.L.

Dra. Alicia Martínez Príncipe
Secretaria de Posgrado
U.N.S.L.



Universidad Nacional de San Luis
Rectorado

"2015 - Año del Bicentenario del Congreso de los Pueblos Libres"

ES COPIA
OSCAR GUILLERMO SEGURA
Director de Despacho
UNSL

SISTEMA DE EVALUACIÓN: 80% de asistencia. Aprobación del 100% de los trabajos prácticos. Aprobación de los seminarios. Aprobación de examen final integrador.

BIBLIOGRAFÍA:

1. R. Parr e W. Yang, "Density Functional Theory of Atoms and Molecules", Oxford Science Publications, 1989.
2. R. M. Dreizler e E. K. U. Gross, "Density Functional Theory. An Approach to the Quantum Many-Body Problem.", Springer-Verlag, 1990.
3. W. Koch, M. C. Holthausen, "A Chemist's Guide to Density Functional Theory", Wiley-VCH, 2001.
4. N. H. Morgon and K. Coutinho (eds), "Métodos de Química Teórica e Modelagem Molecular", Editora Livraria da Física, 2007.

REFERENCIAS:


1. P. A. M. Dirac, *Proc. Camb. Phil. Soc.*, **26**, 376 (1930).
2. P. Hohenberg and W. Kohn, *Phys. Rev.* **136**, B864 (1964).
3. W. Kohn and L. J. Sham, *Phys. Rev.* **140**, A1133 (1965).
4. J. F. Janak, *Phys. Rev. B* **18**, 7165 (1978).
5. N. D. Mermin, *Phys. Rev.* **137**, A1441 (1965).
6. M. Levy, *Phys. Rev. A*, **26**, 1200 (1982).
7. M. Levy and J. P. Perdew, *Phys. Rev. A* **32**, 2010 (1985).
8. B. I. Dunlap, *Phys. Rev. A* **25**, 2847 (1982).
9. R. G. Parr and W. Yang, *Annu. Rev. Phys. Chem.* **46**, 701 (1995).
10. D. R. Salahub, *Adv. Chem. Phys.* **69**, 447 (1987).
11. N. H. Morgon e R. Custódio; *Química Nova*, **18**, 44 (1994).
12. J.C. Slater, *Phys. Rev.*, **81**, 385 (1951).
13. H. Chermette, *J. of Comp. Chem.*, **20**, 129 (1999).
14. G. Frenking, N. Fröhlich, *Chem. Rev.*, **100**(2), 717-774 (1999).

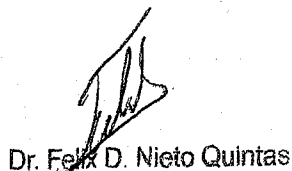
ARANCEL: Sin costo.

COSTOS Y FUENTE DE FINANCIAMIENTO: Programa 55/11 CAPG – CAPES – SPU.

Cpde RESOLUCIÓN R N°
mav

465


Dra. Alicia María
Secretaría de Posgrado
U.N.S.L.


Dr. Félix D. Nieto Quintas
Rector
U.N.S.L.