



IDENTIFICACIÓN

CURSO	: DFT: FUNDAMENTOS TEÓRICOS, HERRAMIENTAS COMPUTACIONALES Y APLICACIONES EN MATERIALES
TRADUCCIÓN	: DFT: THEORETICAL FOUNDATIONS, COMPUTATIONAL TOOLS AND APPLICATIONS IN MATERIALS
SIGLA	: FIM3013
CRÉDITOS	: 15 UC
MÓDULOS	: 2
REQUISITOS	: FIZ0322 y FIZ0412
CONECTOR	: O
RESTRICCIONES	: 030401 (Mag=Física) o 030501 (Doc=Física) o 036001 (Doc=Física) o 030803 (Mag=Física Médica) o 020602 (Mag=Astrofísica) o 020701 (Doc=Astrofísica)
CARÁCTER	: OPTATIVO
TIPO	: CÁTEDRA
CALIFICACIÓN	: ESTÁNDAR
PALABRAS CLAVE	: DENSITY FUNCTIONAL THEORY, PROPIEDADES ELECTRÓNICA, PROPIEDADES MAGNÉTICAS, SIMULACIÓN DE MATERIALES
NIVEL FORMATIVO	: MAGÍSTER

INTEGRIDAD ACADÉMICA Y CÓDIGO DE HONOR

La Universidad tiene un compromiso con la construcción de una cultura de respeto e integridad. Quienes participen de este curso se adscriben al Código de Honor UC y adquieren el compromiso de aportar a la construcción de una cultura de Integridad Académica, actuando en consonancia con los valores de veracidad, confianza, respeto, justicia, responsabilidad y honestidad en todo el trabajo académico.

I. DESCRIPCIÓN DEL CURSO

Este curso aborda los fundamentos fisicomatemáticos de la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT), junto con su aplicación práctica en el estudio de materiales. Los y las estudiantes desarrollarán habilidades para derivar modelos teóricos, implementar simulaciones computacionales y analizar críticamente resultados. La metodología de aprendizaje se llevará a cabo a través de clases teóricas, ejercicios prácticos, talleres y discusión de literatura científica. Se espera que integren teoría y práctica en problemas reales. La evaluación considera tareas computacionales, participación en discusiones y análisis de artículos científicos.

II. RESULTADOS DE APRENDIZAJE

- Derivar las ecuaciones fundamentales de la Teoría del Funcional de la Densidad, en el contexto del modelado cuántico de sistemas electrónicos.
- Analizar las propiedades y limitaciones de funcionales de la energía utilizados en DFT, considerando su aplicabilidad a materiales reales.
- Implementar simulaciones de estructura electrónica con el software ABINIT, para el estudio de propiedades electrónicas y estructurales de materiales.
- Evaluar la convergencia numérica y la fiabilidad de los resultados obtenidos, a partir de parámetros computacionales y criterios físicos.
- Interpretar datos computacionales como bandas electrónicas, densidad de estados y relajaciones estructurales en el marco de la física del estado sólido.
- Valorar críticamente artículos científicos basados en DFT, considerando la pertinencia metodológica, la implementación computacional y la interpretación física de resultados.



III. CONTENIDOS

1. Fundamentos teóricos de la DFT

- 1.1. Teoremas de Hohenberg-Kohn y su significado físico.
- 1.2. Ecuaciones de Kohn-Sham y sus implicancias computacionales.
- 1.3. Limitaciones de DFT y motivaciones para métodos extendidos.

2. Funcionales de la energía y pseudopotenciales

- 2.1. Aproximaciones LDA, GGA y funcionales híbridos.
- 2.2. Pseudopotenciales: conceptos, tipos y formatos.
- 2.3. Selección de funcionales y pseudopotenciales según el tipo de material.

3. Introducción al software ABINIT

- 3.1. Estructura de los archivos de entrada y parámetros básicos.
- 3.2. Instalación, entorno de ejecución y primeros cálculos SCF.
- 3.3. Análisis de salida, verificación y convergencia numérica.

4. Simulación computacional de materiales

- 4.1. Construcción de estructuras cristalinas y relajación geométrica.
- 4.2. Cálculo de bandas electrónicas y densidad de estados.
- 4.3. Estudio de materiales semiconductores y comparación con datos experimentales.

5. Aplicaciones avanzadas de DFT

- 5.1. Sistemas magnéticos y simulaciones con spin polarizado.
- 5.2. Corrección DFT+U y tratamiento de electrones fuertemente correlacionados.
- 5.3. Cálculo de propiedades ópticas y fonónicas.

6. Modelado avanzado de materiales con DFT

- 6.1. Simulación de materiales 2D: estructura, bandas y propiedades emergentes.
- 6.2. Extensión a dinámica molecular basada en DFT.
- 6.3. Introducción a métodos más allá del DFT: GW y TDDFT.

IV. ESTRATEGIAS METODOLÓGICAS

- Clases expositivas
- Aprendizaje colaborativo
- Talleres prácticos
- Estudio de casos científicos

V. ESTRATEGIAS EVALUATIVAS

- Proyecto: 40%
- Informes prácticos: 30%
- Análisis crítico: 15%
- Participación en talleres y actividades de discusión: 15%

VI. BIBLIOGRAFÍA

• Bibliografía mínima:

- Sholl, D. S., & Steckel, Janice A. (2022). *Density Functional Theory: A Practical Introduction* (2nd ed.). Wiley.
- Hafner, J. (2022). *Materials Simulations using Density Functional Theory*. Wiley-VCH.



- Martin, R. M., Reining, L., & Ceperley, D. (2016). *Interacting Electrons: Theory and Computational Approaches*. Cambridge University Press.
- Kresse, G., & Furthmüller, J. (1996). *Efficient Iterative Schemes for Ab Initio Total-Energy Calculations Using a Plane-Wave Basis Set*, *Phys. Rev. B*, 54(16), 11169.
- Perdew, J. P., & Schmidt, K. (2001). *Jacob's Ladder of Density Functional Approximations for the Exchange-Correlation Energy*. In *AIP Conf. Proc.*, 577(1), 1–20.
- Torrent, M. et al. (2008). *ABINIT: Overview and focus on selected capabilities*. *Computational Materials Science*, 42(2), 337–351.

- **Bibliografía complementaria:**

- Burke, K. (2012). *Perspective on density functional theory*. *J. Chem. Phys.*, 136, 150901.
- Giustino, F. (2014). *Materials Modelling using Density Functional Theory: Properties and Predictions*. Oxford University Press.
- Capelle, K. (2006). *A bird's-eye view of density-functional theory*. *Brazilian Journal of Physics*, 36(4A), 1318–1343.
- Baroni, S., de Gironcoli, S., Dal Corso, A., & Giannozzi, P. (2001). *Phonons and related crystal properties from density-functional perturbation theory*. *Rev. Mod. Phys.*, 73(2), 515.
- Kohanoff, J. (2006). *Electronic Structure Calculations for Solids and Molecules: Theory and Computational Methods*. Cambridge University Press.
- Susi, T., Pichler, T., & Ayala, P. (2015). *Electron microscopy of materials at the atomic scale*. *Advances in Physics: X*, 1(1), 1–28.