

## 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

1. Derivar las ecuaciones fundamentales de la Teoría del Funcional de la Densidad, en el contexto del modelado cuántico de sistemas electrónicos.
2. Analizar las propiedades y limitaciones de funcionales de la energía utilizados en DFT, considerando su aplicabilidad a materiales reales.
3. Implementar simulaciones de estructura electrónica con el software ABINIT, para el estudio de propiedades electrónicas y estructurales de materiales.
4. Evaluar la convergencia numérica y la fiabilidad de los resultados obtenidos, a partir de parámetros computacionales y criterios físicos.
5. Interpretar datos computacionales como bandas electrónicas, densidad de estados y relajaciones estructurales en el marco de la física del estado sólido.
6. 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.