

## **Introducción a los métodos de modelado computacional en ciencias de los materiales.**

(Aprobado por la Facultad de Ciencias Exactas de la UNLP como curso de postgrado válido para doctorado, Exp. 0700-012329/17-000).

**Orientado a licenciados en Física, Física Médica, Química, Ingenieros, o carreras afines.**

**Fecha límite de inscripción: 31 de Agosto de 2022.**

**Link para acceder al formulario de inscripción:** <https://forms.gle/p9yQ13okUuUKnJnv5>

**Docentes:** Dr. Eitel L. Peltzer y Blancá, Dr. Leonardo Errico, Dr. Arles V. Gil Rebaza (Facultad de Ciencia Exactas, UNLP). Dr. Ricardo Faccio (Universidad de la República, Montevideo, Uruguay). Dra. Susana Ramos (Universidad Nacional del Comahue)

**Modalidad y evaluación:** teórico-práctico. Curso presencial, con la **posibilidad de realizarlo en forma virtual para aquellos alumnos que no pertenezcan a la UNLP**. Trabajo final usando las herramientas de cálculo presentadas en el curso y defensa del mismo.

En este curso se busca introducir a los estudiantes en los métodos computacionales *ab initio* y técnicas de simulación que se aplican actualmente para el modelado de diversos tipos de materiales y procesos, con especial énfasis en propiedades estructurales, electrónicas, magnéticas e hiperfinas de los mismos. Se desarrollarán los aspectos fundamentales de la Teoría de la Funcional Densidad (DFT) para caracterizar el comportamiento y propiedades de materiales sólidos. Se espera poder brindar el conocimiento necesario que permita a los estudiantes conocer las potencialidades y limitaciones de la metodología, como para que sean capaces de llevar adelante estudios teóricos y experimentales en sistemas de interés.

El curso se dictará desde septiembre a noviembre (dos clases por semana) más un mes para la realización del trabajo final. En el marco del curso se dictarán seminarios dictados por especialistas. Estará dividido básicamente en cuatro partes:

*Primera parte:* consistirá en el desarrollo de clases teóricas, en las que se presentarán los fundamentos de los métodos de modelado computacional *ab initio* basados en la Teoría de la Funcional Densidad.

*Segunda parte:* la modalidad del dictado será compartida entre clases teóricas, sobre las características generales de diferentes códigos de modelización y simulación de materiales. Se realizarán clases prácticas, mediante la utilización de computadoras, empleando diferentes programas de modelado y simulación.

*Tercera parte:* se basará en el desarrollo de temas especiales y aplicaciones específicas a través de seminarios dictados por especialistas invitados.

*Cuarta parte:* constituye la etapa de evaluación que consistirá en el desarrollo de una actividad práctica por parte de los alumnos, la presentación de una monografía, y las consultas correspondientes.

### **PROGRAMA:**

**1: Introducción a la física del sólido y teoría de la funcional densidad.** Introducción al estudio de la materia condensada. Tipos de sólidos, su clasificación. Teorías desarrolladas para su estudio. Teoría de muchos cuerpos. Introducción a la teoría de la funcional densidad.

**2: Teoría de la Funcional Densidad – El método “Linearized Augmented Plane Wave” (FP-LAPW).** Teoría de la funcional densidad. Aproximación de Born-Oppenheimer. El problema de correlación e intercambio: Aproximaciones LSDA, GGA y más allá de LSDA (LSDA+U, funcionales híbridas). Las Ecuaciones de Kohn y Sham. Resolviendo las ecuaciones: El Método FP-LAPW. Propiedades estructurales, electrónicas, y magnéticas: minimizaciones estructurales, fuerzas, momentos magnéticos, propiedades hiperfinas (corrimiento isomérico, gradiente de campo eléctrico, campo hiperfino). Espectros absorción de rayos X (XANES). Estimación del Error en los Cálculos.

**3: Potenciales de correlación e intercambio.** Aproximación de densidad local (LDA): VWN, PZ91, PW92. Aproximación de gradientes generalizados (GGA): PW91, PBE, WC, revPBE, PBEsol. Meta GGA: TB-mBJ, TPSS. Funcionales híbridos: PBE0, HSE, GAU. Ventajas y desventajas. Costo computacional.

**4: Fonones e introducción al código Phonopy.** Propiedades vibracionales, espectro fonónico y diagramas de dispersión utilizando los códigos VASP y Quantum-Espresso. Aproximación de desplazamientos finitos y la Teoría del Funcional de la Densidad Perturbada (DFPT). El código Phonopy, propiedades vibracionales y termodinámicas. Silicio BULK y nanoestructuras de óxido de Titanio.

**5: Termofísica ab initio en la aproximación cuasi-armónica (QHA).** Efectos anarmónicos. Espectro de frecuencias dependiente del volumen. La aproximación cuasi-armónica. Parámetro de Grüneisen. Contribuciones electrónicas. Cálculo de propiedades termodinámicas en la QHA: capacidad calorífica a presión constante, coeficiente de expansión térmica, entropía y energía libre de Gibbs. Ejemplo de aplicación: propiedades vibracionales y termodinámicas de compuestos intermetálicos binarios del tipo  $TM_aX_b$ , ( $TM = Cu, Ni$ ;  $X = In, Sn, Sb$ ).

**6: Propiedades térmicas en la QHA.** Propiedades termodinámicas del Silicio la aproximación QHA. Curva E vs V. Generación de super-celdas con desplazamientos simétricos a diferentes volúmenes en torno al equilibrio a 0 K. Cálculo de fonones para distintos volúmenes. Cálculo de propiedades termodinámicas del Si: capacidad calorífica a presión constante, módulo de compresión coeficiente de expansión térmica, y parámetro de Grüneisen en función de la temperatura.

**Práctica 1: El código Quantum-Espresso.** Criterios de convergencia. Archivo de entrada. Ejecución en paralelo. Elección de pseudopotencial, energía y densidad de corte, *k-points*. Optimización del parámetro de red, estructura de bandas, densidad de estados totales (DOS) y parciales (PDOS), densidad de carga.

**Práctica 2: Sistemas Magnéticos.** Estudio del Fe(BCC). Influencia del *smearing* en sistemas magnéticos. Estructura de bandas, DOS, PDOS. Magnetismo colineal y no-colineal. Cálculos *fixed spin moment* (FSM).

**Práctica 3: Optimización estructural y Sistemas semi-periódicos.** Relajación de posiciones atómicas, optimización de sistemas con parámetros internos. Cálculos tipo “variable-cell relax” (vc-relax). Estudio de Sistemas semi-periódicos (superficies), relajación superficial. Au(001) y Au(110).

**Práctica 4: Más allá de GGA DFT+U: caso del NiO y FeO.** Funcionales híbridas: B3LYP, PBE0, HSE06, GAU, meta-GGA (TB-mBJ): estudio del Si y NiO.

**Práctica 5: Propiedades térmicas y código Phonopy.** Introducción al código Phonopy. Archivos de entrada y salida. Generación de superceldas con desplazamientos finitos. Construcción de la matriz de constantes de fuerzas y archivo de conjunto de fuerzas. Densidad de estados fonónica, su diagrama de dispersión, propiedades termodinámicas y representación irreducible. Efecto del uso de super-celdas con desplazamientos finitos versus el uso de DFPT. Cálculos espectroscópicos: IR y Raman.

### Bibliografía:

- D. S. Sholl, J. A. Steckel, Density Functional Theory. A Practical Introduction, John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, 2009.
- P. Giannozzi *et al.*, Advanced capabilities for materials modeling with QUANTUM ESPRESSO, J. Phys. Condens. Matter 29 (2017) 465901. DOI: 10.1088/1361-648X/aa8f79
- E. Sjöstedt, L. Nordström, D. J. Singh, An alternative way of linearizing the augmented plane-wave method, Solid State Commun. 114 (2000) 15. DOI: 10.1016/S0038-1098(99)00577-3
- G. K. H. Madsen, P. Blaha, K. Schwarz, E. Sjöstedt, L. Nordström, Efficient linearization of the augmented plane-wave method, Phys. Rev. B 64 (2001) 195134. DOI: 10.1103/PhysRevB.64.195134
- P. Blaha, K. Schwarz, G. Madsen, D. Kvasnicka, J. Luitz, R. Laskowski, F. Tran, L. Marks, WIEN2k, An Augmented Plane Wave þ Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties, Karlheinz Schwarz, Techn, Universitt Wien, Austria, 2018, ISBN 3-9501031-1-2.
- G. Prandini, A. Marrazzo, I. Castelli, N. Mounet, N. Marzari, Precision and efficiency in solid-state pseudopotential calculations, Computational Mater. 4 (2018) 1e13. DOI: 10.1038/s41524-018-0127-2.
- D. J. Singh, Planewaves, pseudopotentials and the LAPW method, Capítulo 4, Kluwer Academic Publishers, Boston/Dordrecht/Londres (1994).
- S. Cottenier, Density Functional Theory and the Family of (L)APW-Methods: A Step-by-Step Introduction, KU Leuven, Belgium, 2002. ([http://www.wien2k.at/reg\\_user/textbooks](http://www.wien2k.at/reg_user/textbooks)).
- K. Schwarz, Computation of Materials Properties at the Atomic Scale. Selected Topics in Applications of Quantum Mechanics. <http://dx.doi.org/10.5772/59108>
- J. Leszczynski, M. K. Shukla (eds) Practical Aspects of Computational Chemistry I: An Overview of the Last Two Decades and Current Trends. Springer Science+Business Media B.V. 2012; Chapter 7, p191-207, ISBN 978-94-007-0918-8.
- Trabajos científicos relacionados con cada tema que se discuta.