



Universidad  
Nacional  
de Córdoba



FAMAF  
Facultad de Matemática,  
Astronomía, Física y  
Computación

EXP- UNC: 1736/2018

RES CD N°66/2018

PROGRAMA DE ASIGNATURA	
<b>ASIGNATURA:</b> Cálculos Usando los Métodos de Monte Carlo y Ab Initio	<b>AÑO:</b> 2018
<b>CARACTER:</b> Especialidad	<b>UBICACIÓN EN LA CARRERA:</b> 5° año 1° cuatrimestre
<b>CARRERA:</b> Licenciatura en Física	
<b>REGIMEN:</b> Cuatrimestral	<b>CARGA HORARIA:</b> 120 horas

#### FUNDAMENTACIÓN Y OBJETIVOS

En la actualidad, para realizar cálculos en muchos casos de la física, entre otras ciencias, es necesario el manejo de cálculos numéricos y con uso directo de computadoras.

Dentro de los distintos métodos de cálculo numérico, existen dos metodologías que nos permiten abarcar un sinnúmero de soluciones a situaciones problemáticas, con aplicaciones en la física cuántica y de radiaciones.

En este curso desarrollaremos el método Montecarlo y haremos una introducción a los cálculos ab initio.

Dado que estos métodos de cálculo deben ser realizados en computadoras, es absolutamente imprescindible el manejo de lenguajes de programación. Para ello hemos elegido dos lenguajes de un gran uso en la actualidad. El primero de ellos es el Fortran, pues es un lenguaje de programación científica de mucha aplicación y desarrollo. En nuestro caso veremos el Fortran 77, 90 y 95.

Y el segundo lenguaje que aplicaremos será Python, dado que es un lenguaje moderno, con muchas prestaciones y una variedad muy grande de librerías, preferentemente veremos Python 3.x

El objetivo a alcanzar con ambos lenguajes, es un manejo suficiente para desarrollar los programas de cálculo que sean necesarios para la segunda parte del curso.

Para el módulo de Montecarlo, el objetivo es proporcionarles a los alumnos herramientas de cálculos que se podrán aplicar en el transporte de radiación en la materia, cuyo estudio directo está vinculado en el cálculo de dosis de radiación. Además de ver otras aplicaciones generales, como el caso de cadenas de Markov, soluciones de ecuaciones diferenciales e integrales. El objetivo es proporcionar los conocimientos teóricos y prácticos necesarios para desarrollar y emplear programas de simulación Montecarlo en situaciones de interés en física.

En tanto que en el caso de los cálculos ab initio, los alumnos aprenderán los conceptos básicos de la teoría de la funcional densidad que aporta al desarrollo del cálculo de primeros principios. Lo que permitirá realizar cálculos de optimización de estructuras de metales puros y compuestos, cálculos de bandas, densidades de estados electrónicos y espectros de rayos X de absorción y de emisión (Xanes, Xes).

#### CONTENIDO

##### Programación en Fortran

Elementos de programación, cadenas de caracteres, números, vectores, matrices, sentencias lógicas, números aleatorios, librerías.

##### Programación en Python

Elementos de programación, cadenas de caracteres, números, vectores, matrices, sentencias lógicas, números aleatorios, librerías.

##### Montecarlo

Densidades de Probabilidad, Ley de Grandes números, cadenas de Markov, cálculos Integrales, resolución de ecuaciones diferenciales, uso subrutinas de simulación (PENELOPE), aplicación en cálculos de transporte de radiación y dosis.



EXP- UNC: 1736/2018

RES CD N°66/2018

ab initio

Teoría de la Funcional Densidad, Aproximación de Born Oppenheimer, Modelo de Thomas Fermi  
Teorema de Hohenber-Khon, Teorema de Kohn-Sham, Resolución de la ecuación de Schrödinger,  
Potenciales de correlación e Intercambio: Local density approximation, (LDA), Generalized Gradient  
approximation (GGA), Band gap y potencial semi local (TB-mBJ).

Método de las ondas planas aumentadas (calculos all electron): Wien2k y Método de  
pseudopotenciales: Quantum Espresso.

#### BIBLIOGRAFÍA

##### BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

FORTRAN 90 Programming

T.M.R.Ellis, Ivor R. Phillips, Thomas M. Lahey. Addison-Wesley

Elementos de programación Fortran.

Pablo J. Santamaría. Junio 2012 - Versión 0.1.5

Esta obra se distribuye bajo una licencia de Creative Commons Atribución Compartir Derivadas  
Igual 3.0 Unported.

Python para todos

por Raúl González Duque.

Este libro se distribuye bajo una licencia Creative Commons Reconocimiento 2.5 España.

Applications of Monte Carlo Method in Science and Engineering

Edited by Shlomo Mark and Shaul Mordechai

Published by InTech. J aneza Trdine 9, 51000 Rijeka, Croatia

All chapters are Open Access articles distributed under the Creative Commons Non Commercial  
Share Alike Attribution 3.0 license, which permits to copy, distribute, transmit, and adapt the work  
in any medium, so long as the original work is properly cited.

Grinstead and Snell's Introduction to Probability

The CHANCE Project. Version dated 4 July 2006

This work is freely redistributable under the terms of the GNU Free Documentation License.

<https://math.dartmouth.edu/~prob/prob/prob.pdf>

PENELOPE-2011, A Code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport

Francesc Salvat, Jose M. Fernandez-Varea, Josep Sempau. Facultat de Física(ECM) Universitat de  
Barcelona, Spain.

Density-Functional Theory of Atoms and Molecules

Robert G. Parr and Weitao Yang. University of North Carolina

A Primer in Density Functional Theory

C. Fiolhais F. Nogueira M. Marques. Springer

WIEN2k. An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties

Peter Blaha, Karlheinz Schwarz, Georg K. H. Madsen, Dieter Kvasnicka, Joachim Luitz:

Vienna University of Technology. Institute of Materials Chemistry. Getreidemarkt 9/165-TC. A-1060

Vienna, Austria. ISBN 3-9501031-1-2

[http://susi.theochem.tuwien.ac.at/reg\\_user/textbooks/usersguide.pdf](http://susi.theochem.tuwien.ac.at/reg_user/textbooks/usersguide.pdf)

User's Guide for Quantum ESPRESSO (v.6.2)

[http://www.quantum-espresso.org/wp-content/uploads/Doc/user\\_guide.pdf](http://www.quantum-espresso.org/wp-content/uploads/Doc/user_guide.pdf)

##### BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA



Universidad  
Nacional  
de Córdoba



FAMAF

Facultad de Matemática,  
Astronomía, Física y  
Computación

EXP- UNC: 1736/2018

RES CD N°66/2018

Introductory lecture notes on MARKOV CHAINS AND RANDOM WALKS  
Takis Konstantopoulos, Autumn 2009. <http://www2.math.uu.se/~takis/L/McRw/mcrw.pdf>

Atomic and Electronic, Structure of Solids  
Efthimios Kaxiras. Cambridge University Press. ISBN-10 0-521-52339-7

### EVALUACIÓN

#### FORMAS DE EVALUACIÓN

La Evaluación Final se concretará con la presentación de 6 (seis) Trabajos Prácticos aprobados y una presentación oral del Trabajo Especial que cada alumno realizó.

El Trabajo Especial, puede ser llevado a cabo en grupos de pequeña cantidad de Alumnos si el trabajo y los Alumnos lo requieren.

#### REGULARIDAD

Para alcanzar la condición de Alumno regular es necesario cumplir un mínimo de 70% de asistencia a clases teóricas y prácticas; y aprobar al menos el 60% de los Trabajos Prácticos, es decir 4(cuatro) Trabajos Prácticos.

#### PROMOCIÓN

Los requisitos para adquirir la condición de alumno promocional son: cumplir un mínimo de 80% de asistencia a clases teóricas, prácticas; aprobar todos los Trabajos Prácticos (6 -seis- Trabajos Prácticos), el Trabajo Especial con una nota no menor a 6 (seis) y Aprobar un coloquio.

### CORRELATIVIDADES

Para Cursar: Especialidad I (regularizada)

Métodos Numéricos (regularizada)

Para Promocionar: Especialidad I (aprobada)

Métodos Numéricos (aprobada)

es  
F  
es