

EX-2026-00509716- -UNC-ME#FAMAF

PROGRAMA DE ASIGNATURA	
ASIGNATURA: Teoría del Funcional de la Densidad y Cálculos Ab Initio	AÑO: 2026
CARÁCTER: Especialidad	UBICACIÓN EN LA CARRERA: 4° año 2° cuatrimestre
CARRERA: Licenciatura en Física	
RÉGIMEN: Cuatrimestral	CARGA HORARIA: 120 horas

FUNDAMENTACIÓN Y OBJETIVOS

La teoría del funcional de la densidad (o DFT, por sus siglas en inglés, Density Functional Theory), es una teoría desarrollada para el cálculo de sistemas de muchos cuerpos, especialmente de grandes números de electrones y átomos.

Su aplicación a sistemas electrónicos, es un procedimiento variacional alternativo a la solución de la ecuación de Schrödinger, donde el funcional de la energía electrónica es minimizado con respecto a la densidad electrónica. Es uno de los métodos más utilizados en los cálculos cuánticos de la estructura electrónica de la materia, tanto en física como en química cuántica. El origen de la teoría del funcional de la densidad electrónica se encuentra en un modelo desarrollado por Llewellyn Thomas y Enrico Fermi a final de los años 1920.

No obstante, no fue hasta mediados de los años 1960 cuando las contribuciones de Pierre Hohenberg, Walter Kohn y Lu Sham establecieron el formalismo teórico en el que se basa el método desarrollado actualmente.

En 1998 Walter Kohn, físico teórico austriaco nacionalizado estadounidense, recibió el premio Nobel de Química por sus aportes al desarrollo de esta teoría. Los métodos tradicionales dentro de las teorías de la estructura electrónica de la materia, en particular la teoría de Hartree-Fock y los derivados de este formalismo, se basan en una función de onda multieletrónica.

La resolución directa de la ecuación de Schrödinger proporciona una descripción precisa del comportamiento de sistemas cuánticos muy pequeños, como átomos simples o moléculas pequeñas. Sin embargo, a medida que aumenta la complejidad del sistema, las ecuaciones resultantes se vuelven cada vez más difíciles de resolver, tanto numérica como analíticamente. Esto se debe a que el número de partículas involucradas y las interacciones entre ellas aumentan significativamente, lo que conduce a ecuaciones altamente complejas que requieren recursos computacionales considerablemente grandes para su resolución. Por lo tanto la aplicabilidad práctica de la ecuación de Schrödinger se ve limitada en sistemas más grandes y complejos. Es aquí donde métodos alternativos como la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) se vuelven especialmente útiles, ya que ofrecen una forma más eficiente de abordar problemas de estructura electrónica de sistemas más grandes. La DFT reformula el problema para ser capaz de obtener, por ejemplo, la energía y la distribución o densidad electrónica del estado fundamental, trabajando con el funcional de la densidad electrónica en lugar de hacerlo con la función de ondas. Una ventaja es que la densidad es una magnitud más simple que la función de ondas y por lo tanto más fácil de calcular. Y en la práctica son accesibles sistemas mucho más complejos: la función de ondas de un sistema de N electrones depende de $3N$ variables, mientras que la densidad electrónica solo depende de 3 variables. Originalmente, la DFT se desarrolló en el marco de

**UNC**Universidad
Nacional
de Córdoba**FAMAF**Facultad de Matemática,
Astronomía, Física y
Computación

EX-2026-00509716- -UNC-ME#FAMAF

la teoría cuántica no relativista (ecuación de Schrödinger independiente del tiempo) y de la aproximación de Born-Oppenheimer.

El tipo más común de cálculo ab initio es llamado cálculo Hartree Fock (HF), en el cual la aproximación principal es llamada aproximación de campo central. Un método ab initio alternativo es la DFT. En este tipo de cálculos, hay un Hamiltoniano aproximado y una expresión aproximada de la densidad electrónica total. El aspecto favorable de los métodos ab initio es que eventualmente convergen en la solución exacta, una vez que todas las aproximaciones se han hecho suficientemente pequeñas en magnitud.

El término “Ab initio” proviene del Latín y significa “desde el principio”. Se da este nombre a los cómputos derivados directamente de principios teóricos (tales como la ecuación de Schrödinger), sin incluir información experimental. Las aproximaciones usadas son usualmente matemáticas, tales como usar una forma funcional más simple de una función, u obtener una solución aproximada a una ecuación diferencial.

Originalmente, la DFT se desarrolló en el marco de la teoría cuántica no relativista (ecuación de Schrödinger independiente del tiempo) y de la aproximación de Born-Oppenheimer. La teoría fue extendida posteriormente al dominio de la mecánica cuántica dependiente del tiempo, y se habla de la TD-DFT o Teoría del Funcional de la Densidad Dependiente del Tiempo y del dominio relativista. Entre otras cosas, esto permite calcular estados excitados y obtener la densidad de estados electrónicos vinculados con espectros de emisión y absorción.

La teoría de perturbaciones de muchos cuerpos (MBPT) ofrece herramientas poderosas como el formalismo de la ecuación de Bethe-Salpeter (BSE) que fue introducido por primera vez en 1951 para calcular estados ligados de dos partículas. En el contexto de la absorción óptica, el formalismo de la BSE se utiliza para describir excitaciones de pares electrón-hueco. De particular interés son los pares electrón-hueco ligados con energías por debajo del band gap, que son cuasi-partículas conocidas como excitones. La BSE puede formularse como un problema de auto valores de un Hamiltoniano relativista efectivo de dos partículas.

Dado que la BSE describe pares electrón-hueco interactuantes, es natural introducir una base de dos partículas que refleje la excitación (términos resonantes) y la desexcitación (términos anti-resonantes) de pares electrón-hueco independientes. La teoría fue extendida al dominio de la mecánica cuántica dependiente del tiempo, y se habla de la TD-DFT o Teoría del Funcional de la Densidad Dependiente del Tiempo y del dominio relativista. Entre otras cosas, esto permite calcular estados excitados y obtener la densidad de estados electrónicos vinculados con espectros de emisión y absorción.

Objetivos del curso

El objetivo de este curso es dar una introducción a la DFT, mediante el estudio evolutivo y desarrollo de la teoría. En la aproximación de Born-Oppenheimer se considera que los núcleos son mas pesados y se desprecia su energía cinética, por lo tanto se reduce el problema de muchos cuerpos a un gas de electrones que se mueve en un potencial externo dado por los iones. Se presentará el Modelo semiclásico de Thomas Fermi, como la relación entre el potencial externo y la densidad es obtenido minimizando la energía total con respecto a la densidad y el modelo de gas de electrones no interactuantes, para mostrar el primer esfuerzo de formular la Teoría de la Funcional Densidad.

Se muestra que la DFT está fundamentada por dos teoremas de Hohenberg-Kohn que permiten asegurar que el estado fundamental de un sistema de partículas queda completamente caracterizado estudiando su densidad. Se muestra que cualquier observable del estado fundamental es una funcional de la densidad. A partir de estos teoremas es posible desarrollar un método computacional para calcular propiedades de un sistema resolviendo las ecuaciones de Kohn-Sham. La energía de K-S contiene un término de Hartree y un término de correlación e intercambio que no es posible calcular de manera exacta. Se expondrán las aproximaciones para este término de correlación e intercambio

EX-2026-00509716- -UNC-ME#FAMAF

que son parte fundamental del método de cálculo: la aproximación densidad local (LDA), las aproximaciones de gradientes generalizada (GGA), como la de Perdew–Burke–Ernzerhof (PBE) y la aproximación Becke–Johnson modificada mBJ que permite mejorar los resultados para estados excitados. Se presentarán métodos all electron, como también métodos que resuelven las ecuaciones de K-S mediante pseudopotenciales para la resolución de sistemas físicos de interés.

En la aplicación de la metodología ab initio, se considerarán celdas básicas, así como super cells para sistemas cristalinos, se incorpora vacío cuando se tratan superficies, también se pueden tratar nanomateriales (low dimension). Es también posible tratar sistemas sin simetría como moléculas o macro moléculas. Como parte del curso se harán trabajos prácticos sobre sistemas masivos, superficies y sistemas bidimensionales. Al finalizar el curso el/la estudiante estará en condiciones de realizar cálculos ab initio para distintos sistemas físicos, con una variedad de programas de cálculo. Es también posible tratar sistemas sin simetría como moléculas o macro moléculas.

Extenderemos el curso a programas que incluyen la aplicación del formalismo BSE para calcular estados excitados.

CONTENIDO

1. Título de la Unidad I: Hamiltoniano cuántico DFT

Hamiltoniano cuántico mediante el cual se resuelve el problema de muchos cuerpos. Aproximación de BornOppenheimer. Gas de electrones confinados en un volumen. Modelo de Thomas Fermi (TF) del gas de electrones no interactuantes. Las ecuaciones de TF junto con el principio variacional como primera formulación de la DFT.

2. Título de la Unidad II: Fundamentación de la Teoría del Funcional de la Densidad.

Teoría del funcional de la densidad electrónica para sistemas de partículas interactuantes en un potencial externo. Teoremas de Hohenberg y Kohn. Ecuaciones de Kohn-Sham. Funcional universal para la energía. Densidad exacta del nivel fundamental para minimizar la energía.

3. Resolución del problema mediante la autoconsistencia. Funcional de correlación e intercambio

Modelos de LDA y GGA para la correlación e intercambio. Electrones en la estructura periódica de la banda de cristales. Simetrías cristalinas y simetrías de la red recíproca. Funciones de Bloch.

Modelos de Electrones casi libres y Tight binding. Combinación lineal de Orbitales atómicos LCAO. Estructuras de bandas de orbitales s y p. Funciones Wannier máximamente localizadas.

4. Cálculos all electron: WIEN2k

Presentación del Software WIEN2k. Inicialización del cálculo autoconsistente. Análisis de inputs, estructura cristalina y variables del cálculo. Cálculos de densidad de estados, estructura de bandas, densidad electrónica de carga, espectros de absorción y emisión. Funciones de Wannier máximamente localizadas.

5. Método de los Pseudopotenciales: Quantum Espresso

Presentación del software Quantum Espresso. Pseudopotenciales. Sistema periódico de los estados de K-S como una suma de ondas planas. Cálculos autoconsistentes. Análisis de

EX-2026-00509716- -UNC-ME#FAMAF

archivos de entrada, ejemplos. Cálculos de sistemas sin periodicidad. NEB.

6. Estados excitados y dinámica molecular ab initio

Presentación de otras metodologías de primeros principios. Introducción a los programas exciting y ORCA. Cálculos autoconsistentes all-electron. Teoría de perturbaciones de muchos cuerpos (GW y ecuación de Bethe-Salpeter) para el estudio de estados excitados y propiedades ópticas. Introducción a la dinámica molecular ab initio y su aplicación al estudio de la estabilidad estructural, propiedades dinámicas y efectos de temperatura en moléculas y materiales. Análisis e interpretación de archivos de entrada y resultados computacionales.

BIBLIOGRAFÍA

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

- Density-Functional Theory of Atoms and Molecules (International Series of Monographs on Chemistry) Autor Robert G. Parr, Autor, Colaborador Yang Weitao Editor: Oxford University Press; Edición: New Ed (1 de enero de 1989) Colección: International Series of Monographs on Chemistry ISBN-10: 0195092767. ISBN-13: 978-0195092769
- A Primer in Density Functional Theory Editors: Fiolhais, Carlos, Nogueira, Fernando, Marques, Miguel A.L. ISBN 978-3-540-37072-71.
- Density Functional Theory: A Practical Introduction Author(s): David S. Sholl Janice A. Steckel Print ISBN:9780470373170 |Online ISBN:9780470447710 |DOI:10.1002/9780470447710. Copyright © 2009 John Wiley & Sons, Inc.
- Blaha, P.; Schwarz, K.; Tran, F.; Laskowski, R.; Madsen, G. K. H.; Marks, L. D. WIEN2k: An APW+lo program for calculating the properties of solids. Journal of Chemical Physics 152, 074101 (2020).
- Quantum ESPRESSO: Giannozzi et al., J. Phys.: Condens. Matter 21, 395502 (2009); y Giannozzi et al., J. Phys.: Condens. Matter 29, 465901 (2017).
- ORCA: Neese, F. Software update: The ORCA program system—Version 5.0. WIREs Computational Molecular Science 12, e1606 (2022).

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

- Blaha, P.; Schwarz, K.; Madsen, G. K. H.; Kvasnička, D.; Luitz, J.; Laskowski, R.; Tran, F.; Marks, L. D. WIEN2k User's Guide, Version 24.1. Vienna University of Technology, Vienna, Austria, 2024. Disponible en: <https://www.wien2k.at>
- Giannozzi, P. et al. QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials. Journal of Physics: Condensed Matter 21, 395502 (2009).
- Giannozzi, P. et al. Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO. Journal of Physics: Condensed Matter 29, 465901 (2017). Quantum ESPRESSO Foundation. Quantum ESPRESSO User's Guide, Version 7.5.0, 2026. Disponible en: <https://www.quantum-espresso.org>
- Neese, F.; Wennmohs, F.; Becker, U.; Riplinger, C. et al. ORCA 6.1.1 Manual. Max Planck Institute for Chemical Energy Conversion, Mülheim an der Ruhr, Germany, 2026. Disponible en: <https://orca-manual.mpi-muelheim.mpg.de>
- Gulans, A.; Kontur, S.; Meisenbichler, C.; Nabok, D.; Pavone, P.; Rigamonti, S.; Sagmeister, S.; Werner, U.; Draxl, C. exciting: A full-potential all-electron package implementing density-functional theory and many-body perturbation theory. Journal of Physics: Condensed Matter 26, 363202 (2014).

**UNC**Universidad
Nacional
de Córdoba**FAMAF**Facultad de Matemática,
Astronomía, Física y
Computación

EX-2026-00509716- -UNC-ME#FAMAF

METODOLOGÍA DE ENSEÑANZA

La asignatura se desarrolla mediante una modalidad teórico-práctica, combinando clases expositivas con actividades de resolución de problemas y prácticas computacionales. La secuenciación de los contenidos sigue el desarrollo histórico y conceptual de la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT), comenzando con la formulación del problema cuántico de muchos cuerpos y las aproximaciones de Born-Oppenheimer y Thomas-Fermi. Posteriormente se introducen los fundamentos de la DFT a través de los teoremas de Hohenberg-Kohn y las ecuaciones de Kohn-Sham, para luego abordar los distintos funcionales de intercambio y correlación (LDA, GGA y mBJ), los métodos all-electron y de pseudopotenciales, y finalmente las aplicaciones a sistemas reales utilizando software de cálculo de uso extendido en investigación.

Las clases combinan exposiciones teóricas con demostraciones prácticas en computadora, en las que se analizan casos de estudio representativos de materiales masivos, superficies, sistemas bidimensionales y moléculas. A medida que avanzan los contenidos, los/las estudiantes adquieren progresivamente las herramientas necesarias para realizar cálculos de estructura electrónica y analizar críticamente los resultados obtenidos.

Las actividades propuestas incluyen la resolución de ejercicios conceptuales y numéricos, el análisis e interpretación de resultados de simulaciones, el desarrollo de trabajos prácticos computacionales, la elaboración y modificación de archivos de entrada para distintos programas de cálculo, la visualización e interpretación de estructuras electrónicas, densidades de carga, densidades de estados y estructuras de bandas, así como el estudio de bibliografía científica relacionada con las metodologías empleadas. Como instancia integradora, los/as estudiantes desarrollan cálculos completos sobre sistemas físicos de interés, aplicando las metodologías estudiadas durante el curso.

Para el desarrollo de las actividades se utilizan presentaciones elaboradas por la cátedra, guías de trabajos prácticos, bibliografía especializada y el aula virtual como espacio para la distribución de material, comunicación y entrega de actividades. En las prácticas computacionales se emplean programas ampliamente utilizados en ciencia de materiales y química computacional, tales como *WIEN2k*, *Quantum ESPRESSO*, *exciting* y *ORCA*, complementados con herramientas de visualización y análisis de estructuras cristalinas, densidades electrónicas y propiedades espectrales.

La dinámica de trabajo combina actividades individuales y discusiones colectivas orientadas a la interpretación física de los resultados. Durante las prácticas el docente acompaña de manera permanente el desarrollo de los cálculos, promoviendo la resolución de dificultades, la comparación de diferentes metodologías y la discusión crítica de las aproximaciones utilizadas. Se fomenta además el aprendizaje autónomo mediante la realización de cálculos fuera del horario de clase, favoreciendo que los estudiantes adquieran las competencias necesarias para aplicar técnicas de primeros principios en problemas actuales de investigación en física, ciencia de materiales y química computacional.

EVALUACIÓN**FORMAS DE EVALUACIÓN**

Desarrollo y aplicación de programas de cálculos, en el aula o para entregar como Trabajos Prácticos. Como Examen final la defensa de un trabajo original aplicando lo aprendido durante el curso a alguno problema en particular.



UNC

Universidad
Nacional
de Córdoba

FAMAF

Facultad de Matemática,
Astronomía, Física y
Computación

EX-2026-00509716- -UNC-ME#FAMAF

REGULARIDAD

- Cumplir un mínimo de 70% de asistencia a clases teóricas, prácticas, o de laboratorio.
- Aprobar al menos el 60% de los Trabajos Prácticos o de Laboratorio.

PROMOCIÓN

- Cumplir un mínimo de 80% de asistencia a clases teóricas, prácticas, o de laboratorio.
- Aprobar todos los Trabajos Prácticos o de Laboratorio con una nota no menor a 6 (seis).
- Aprobar un coloquio.

CORRELATIVIDADES

Para Cursar: Métodos Numéricos (aprobada)

Para Cursar: Mecánica Cuántica I (regularizada)

Para Rendir: Mecánica Cuántica I (aprobada)