

Título: Cálculo de propiedades magnéticas a partir de la teoría de la funcional de la densidad.

Programa tentativo:

• **Día 1:**

○ **Introducción a la teoría de la funcional de la densidad (density functional theory; DFT).**

§ Los teoremas de Hohenberg-Kohn y Kohn-Sham.

§ Extensiones: Spin y dependencia temporal. Aproximaciones mas comúnmente utilizadas, desde la aproximación de densidad local (LDA), gradiente generalizado (GGA), meta-GGA, y funcionales híbridas.

○ **Implementaciones prácticas de DFT.**

§ Bases localizadas y ondas planas.

§ Potenciales efectivos.

§ Ecuaciones auto-consistentes: Técnicas y estrategias de convergencia.

§ DFT en práctica. Desempeño típico para propiedades generales de moléculas y sólidos.

§ Estrategias para evaluar el desempeño de DFT: Condiciones exactas y validación empírica.

• **Día 2:**

○ **DFT para sistemas magnéticos.**

§ Spin DFT y Spin DFT no colineal.

§ Estados y simetría de spin en DFT. DFT con campo magnético externo.

§ Aproximaciones para sistemas con electrones desapareados.

§ Contaminación de spin.

§ Efectos relativistas a partir de la ecuación de Dirac: efectos escalares y spin-órbita.

§ La transformación de Douglas-Kroll-Hess y otras aproximaciones cuasi-relativistas.

○ **Teoría de respuesta.**

§ Propiedades electrónicas a partir de derivadas de la energía electrónica.

§ Conexión entre perturbaciones externas y propiedades.

§ Relación entre restricciones formales y respuesta.

§ Ejemplos: Propiedades y excitaciones. Métodos de respuesta lineal en DFT.

• **Día 3:**

○ **Cálculo de propiedades magnéticas a partir de DFT I.**

§ Sistemas de capa cerrada.

§ Magnetismo orbital en DFT.

§ Parámetros de resonancia magnética nuclear (NMR): Acoplamientos magnéticos entre spines nucleares y apantallamiento nuclear.

§ Susceptibilidad magnética orbital.

§ Interacción Spin-órbita.

§ Ejemplos: Desempeño típico de DFT para propiedades de NMR.

• **Día 4:**

○ **Cálculo de propiedades magnéticas a partir de DFT II.**

- § Sistemas de capa abierta.
- § El modelo de Heisenberg-Dirac-van Vleck (HDVV).
- § Relación entre experimentos y estructura electrónica.
- § Determinación de parámetros en el Hamiltoniano efectivo de HDVV a partir de DFT: Constantes de acoplamiento de intercambio magnético y anisotropía magnética.
- § El tensor g .
- § Ejemplos: Imanes moleculares y complejos con metales de transición.
- § Desempeño típico de DFT para parámetros magnéticos.
- **Día 5: Resumen, discusión, conclusiones y examen.**

- Bibliografía:
 - “Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods”, Richard Martin (Cambridge University Press, 2004).
 - “Introduction to Computational Chemistry”, Frank Jensen (Wiley, Second Edition, 2007).
 - Ab Initio Methods for the Calculation of NMR Shielding and Indirect Spin-Spin Coupling Constants, T. Helgaker, M. Jaszuński, and K. Ruud, Chem. Rev. 99, 293-352 (1999).
 - Density Functional Studies of Molecular Magnets, A. V. Postnikov, J. Kortus, and M. R. Pederson, phys. stat. sol. (b) 243, 2533-2572 (2006).

Número de horas del curso: El curso está diseñado para aproximadamente 25 horas (5 días de 5 horas cada uno). Las clases Teóricas son 2 horas diarias y las Prácticas 3 horas diarias en los LABS del Departamento de Física.

Fecha: 29 de mayo a 2 de junio