

Introducción a los métodos de modelado computacional en Ciencia de los Materiales.

Curso de posgrado válido para cubrir exigencias del Doctorado. Segundo semestre de 2023.

Contacto: errico@fisica.unlp.edu.ar; eitelp@gmail.com

Fecha de inscripción: del 15 de julio al 15 de agosto de 2023 en el siguiente link:

<https://forms.gle/E8Hpnh2d1L18RS43A>

Docentes: Dr. Leonardo Errico (responsable), Dr. Eitel Peltzer y Blancá, Dr. Arles Gil Rebaza, Dr. Ricardo Faccio (Profesor Visitante), Dra. Susana Ramos (Profesor Visitante), Dra. Valeria Ferrari (Profesor Visitante).

Modalidad: Teórico-práctico, presencial para estudiantes de Doctorado de la Facultad de Ciencias Exactas de la UNLP. Se harán videoconferencias en tiempo real para aquellos estudiantes que no pertenezcan a dicho doctorado y estén fuera del ámbito de La Plata.

Carga horaria: 4 horas por semana, dos clases de 2 horas. 38 horas de teoría, 12 horas de práctica. Trabajo final con defensa del mismo.

Fecha estimada de inicio: segunda semana de septiembre de 2023.

Contenido y actividades.

La Ciencia de Materiales Computacional hoy en día es capaz de predecir propiedades electrónicas, vibracionales, ópticas, magnéticas, vibracionales y de transporte, entre otras, de sólidos y moléculas, lo que permite el diseño de materiales con características óptimas para aplicaciones tecnológicas específicas. El modelado computacional también encuentra un lugar prominente junto a las investigaciones experimentales, ya que éstas a menudo requieren de simulaciones computacionales a fin de interpretar los datos obtenidos u obtener un resultado cuantitativo en lugar de sólo uno cualitativo.

En este curso se busca introducir a los estudiantes en los métodos computacionales de primeros principios basados en el teorema de la funcional densidad (DFT) y técnicas de simulación que se aplican actualmente para el modelado de diversos tipos de materiales, con especial énfasis en nanomateriales, dispositivos semiconductores, superficies y propiedades estructurales, electrónicas, magnéticas, termodinámicas, vibracionales e hiperfinas de los mismos. Se desarrollarán los aspectos fundamentales de DFT, aplicada principalmente para caracterizar el comportamiento y propiedades de sólidos. Se espera poder brindar el conocimiento necesario que permita a los estudiantes conocer las potencialidades y limitaciones de la metodología y que sean capaces de llevar adelante estudios teóricos y experimentales en sistemas de interés.

Programa

1- Introducción al estudio de la materia condensada. Tipos de sólidos, su clasificación. Teoría de muchos cuerpos. Teoría de la funcional densidad.

2- Ondas planas, ondas planas linearizadas, potenciales completos y pseudopotenciales. Aproximación de Born-Oppenheimer. El problema de correlación e intercambio. Las Ecuaciones de Kohn y Sham. Resolviendo las ecuaciones: El método full-potential linearized augmented plane wave (FP-LAPW). Pseudopotenciales. Propiedades estructurales, electrónicas, y magnéticas. Minimización estructural, fuerzas, momentos magnéticos, propiedades hiperfinas (corrimiento isomérico, gradiente de campo eléctrico, campo hiperfino). Metales, óxidos semiconductores, volumen y superficie. Espectros absorción de rayos X (XANES). Estimación de la barra de error en los Cálculos.

3- Potenciales de correlación e intercambio. Aproximación de densidad local (LDA), de gradientes generalizados (GGA), funcionales híbridas. Ventajas y desventajas. Costo computacional.

4- Introducción al magnetismo y origen de las propiedades magnéticas en materiales. El magnetón de Bohr. Espintrónica. Ecuaciones DFT para sistemas polarizados en espín. Tipos de materiales magnéticos: electrones localizados versus electrones itinerantes. Ferromagnetismo, antiferromagnetismo, ferrimagnetismo y magnetismo no colineal. Modelos de Stoner, de Hubbard, de Heisenberg. Efecto Kondo e interacción RKKY.

Mapeo en hamiltonianos-modelo para evaluar constantes mediante cálculos DFT. Sistemas magnéticos explorados con DFT: heteroestructuras de óxidos, manganitas, transporte polarizado en espín por nanotubos de carbono, ferromagnetismo a temperatura ambiente en nitruro de galio manganeso.

5- Propiedades vibracionales, espectro fonónico y diagramas de dispersión. Aproximación de desplazamientos finitos y la Teoría del Funcional de la Densidad Perturbada (DFPT). El código Phonopy, propiedades vibracionales y termodinámicas. Si bulk y nanoestructuras de óxido de Titanio.

6- Termodinámica ab initio en la aproximación cuasi-armónica. Efectos anarmónicos. Espectro de frecuencias dependiente del volumen. La aproximación cuasi-armónica (QHA). 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. Aplicaciones: propiedades vibracionales y termodinámicas de compuestos intermetálicos binarios del tipo $T\text{MaXb}$, ($\text{TM} = \text{Cu}, \text{Ni}$; $\text{X} = \text{In}, \text{Sn}, \text{Sb}$).

Tutoriales (prácticas hands-on)

Práctica 1- El código Quantum-Espresso. Instalación. Criterios de convergencia. Archivo de entrada. Ejecución en paralelo. Elección de pseudopotencial, energía de corte, densidad de corte, muestreo de la zona de Brillouin, número de puntos k . Optimización del parámetro de red, estructura de bandas, densidad de estados total (DOS) y parcial (PDOS), densidad de carga. Práctica

Práctica 2- Sistemas Magnéticos. 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 de sistemas con grados de libertad internos. Cálculos de relajación con celda variable (vc-relax). 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 vibracionales y térmicas en aproximación armónica. Introducción al código Phonopy. Archivos de entrada y salida. Generación de super-celdas con desplazamientos finitos. Construcción de la matriz de constantes de fuerzas y archivo de conjunto de fuerzas. Densidad de estados fonónica, 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.

Práctica 6- Propiedades termodinámicas del Si la aproximación QHA. Curva E vs V. Generación de super-celdas con desplazamientos simétricos a diferentes volúmenes en torno al equilibrio a $T=0$ 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, parámetro de Grüneisen en función de la temperatura.