



EXP-UNC 0058325/2019

**VISTO**

La Resolución CD N° 209/2017 que regula el funcionamiento de los Cursos de Posgrado de la Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación; y

**CONSIDERANDO**

Que en su Artículo 5º, la misma establece que los cursos aprobados en una carrera de doctorado conservan su validez por 3 años, lapso durante el cual no requieren revisión;

Que en el caso de los cursos de posgrado no estructurados, la mencionada Resolución no establece el tiempo de validez;

Que el Consejo de Posgrado ha evaluado y aceptado nuevas propuestas de cursos de posgrado para el primer cuatrimestre del año 2020.

**Por ello,**

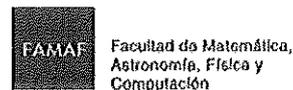
**EL CONSEJO DIRECTIVO  
DE LA FACULTAD DE MATEMÁTICA, ASTRONOMÍA, FÍSICA Y COMPUTACIÓN**

**RESUELVE:**

**ARTÍCULO 1º:** Aprobar para el Doctorado en Matemática los siguientes cursos de posgrado con el número de créditos consignado en cada caso.

Curso de Posgrado	Número de créditos
Análisis armónico en pares de Gelfand	3 créditos
Biología matemática	3 créditos
Introducción a la geometría simpléctica	3 créditos
Superficies de Riemann	3 créditos

SP  
↓



EXP-UNC 0058325/2019

**ARTÍCULO 2º:** Aprobar para el Doctorado en Astronomía el siguiente curso de posgrado con el número de créditos que se consigna.

Curso de Posgrado	Número de créditos
Computación paralela	3 créditos

**ARTÍCULO 3º:** Aprobar para el Doctorado en Física los siguientes cursos de posgrado con el número de créditos consignado en cada caso.

Curso de Posgrado	Número de créditos
Biología matemática	3 créditos
Computación paralela	3 créditos
Dispersión inelástica de rayos X	3 créditos
Microcontroladores - sistemas embebidos	3 créditos
Simetrías en relatividad general y teoría de campos	3 créditos
Sistemas compuestos basados en el carbono y nanoestructuras magnéticas	3 créditos
Teoría cuántica de campos en sólidos II: fenómenos fuera de equilibrio	3 créditos
Teoría del funcional de la densidad y cálculos ab initio	3 créditos

**ARTÍCULO 4º:** Aprobar para el Doctorado en Ciencias de la Computación los siguientes cursos de posgrado con el número de créditos consignado en cada caso.

Curso de Posgrado	Número de créditos
Biología matemática	3 créditos
Computación paralela	3 créditos
Microcontroladores - Sistemas embebidos	3 créditos



UNC

Universidad  
Nacional  
de Córdoba



Facultad de Matemática,  
Astronomía, Física y  
Computación

EXP-UNC 0058325/2019

**ARTÍCULO 5º:** Aprobar por el término de tres (3) años el siguiente curso de posgrado no estructurado, con la carga horaria que se consigna.

Curso de Posgrado	Carga horaria
Computación en la nube	64 hs

**ARTÍCULO 6º:** Establecer como objetivos, contenidos, programas, bibliografía, modalidades de evaluación y otras especificaciones de los cursos de posgrado aprobados, los provistos en el Anexo que forma parte de la presente.

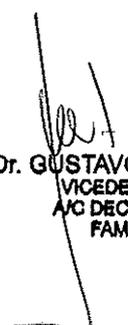
**ARTÍCULO 7º:** Notifíquese, publíquese y archívese.

DADA EN LA SALA DE SESIONES DEL CONSEJO DIRECTIVO DE LA FACULTAD DE MATEMÁTICA, ASTRONOMÍA, FÍSICA Y COMPUTACIÓN A NUEVE DÍAS DEL MES DE DICIEMBRE DE DOS MIL DIECINUEVE.

**RESOLUCIÓN CD N° 413/2019**

SP

  
Dra. SILVIA PATRICIA SILVETTI  
SECRETARIA GENERAL  
FaMAF

  
Dr. GUSTAVO A. MONTI  
VICEDECANO  
AJC DECANATO  
FAMAF



Universidad  
Nacional  
de Córdoba



Facultad de Matemática,  
Astronomía, Física y  
Computación

EXP-UNC 0058325/2019

Anexo de la RCD FAMAF 413/2019, página 1 de 33

<b>TÍTULO:</b> Análisis armónico en pares de Gelfand			
<b>AÑO:</b> 2020	<b>CUATRIMESTRE:</b> 1°	<b>N° DE CRÉDITOS:</b> 3	<b>VIGENCIA:</b> 3 años
<b>CARGA HORARIA:</b> 60 horas de teoría, 20 horas de práctica			
<b>CARRERA/S:</b> Doctorado en Matemática			

#### FUNDAMENTOS

En este curso el alumno obtendrá un conocimiento elemental sobre pares de Gelfand y transformada esférica, lo que abarcará medida en grupos topológicos, conceptos básicos de representaciones y funciones esféricas. Estos temas se desarrollarán en el ejemplo del grupo de Heisenberg bajo la acción del grupo unitario dando aplicaciones a ecuaciones diferenciales.

#### OBJETIVOS

El objetivo principal del curso es estudiar los conocimientos básicos de la teoría de pares de Gelfand. Profundizar estos temas en el caso del grupo de Heisenberg estudiando las representaciones del grupo y el operador sub-Laplaciano, estableciendo su relación con la transformada de Gelfand. Determinar la fórmula de inversión para funciones radiales. Además se aplicarán estos conocimientos como herramienta para el estudio de ecuaciones diferenciales en el grupo de Heisenberg.

#### PROGRAMA

##### Unidad 1: Pares de Gelfand.

Pares de Gelfand y funciones esféricas: generalidades. Funciones de tipo positivo y funciones esféricas de tipo positivo. Ejemplos. La transformada esférica.

##### Unidad 2: El grupo de Heisenberg.

El grupo de Heisenberg  $H_n$  y el par de Gelfand  $(H_n, U(n))$ , donde  $U(n)$  denota el grupo unitario. El sub-Laplaciano. Funciones de Hermite y Laguerre. Representaciones unitarias e irreducibles de  $H_n$ . Determinación de las funciones esféricas. Abanico de Heisenberg. Determinación de la transformada esférica: fórmula de inversión para funciones radiales.

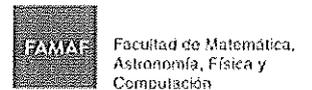
##### Unidad 3: Aplicaciones.

Determinación de la solución fundamental para el sub-Laplaciano del grupo de Heisenberg, fórmula de Folland. La ecuación del calor en el grupo de Heisenberg, construcción de una solución fundamental.

#### PRÁCTICAS

Como actividad práctica se le requerirá a los alumnos presentar trabajos donde se amplíen algunos de los temas desarrollados. Estos trabajos se expondrán en clases.

SH  
M



EXP-UNC 0058325/2019

Anexo de la RCD FAMAF 413/2019, página 2 de 33

**BIBLIOGRAFÍA**

"Analyse Harmonique." J. Faraut. Les cours de C.I.M.P.A.  
"Deux Cours D'Analyse Harmonique." J. Faraut y K. Harzallah. Progress in mathematics. Vol 69, Birkhauser, 1987.  
"Harmonic Analysis on the Heisenberg group." S. Thangavelu. Progress in mathematics. Vol 159, Birkhauser, 1998.  
"The Fourier transform on the Heisenberg group." Notas de F. Ricci expuestas en la red.

**MODALIDAD DE EVALUACIÓN**

Para la regularidad se pedirá la exposición de un trabajo práctico. Para aprobar el curso se debe superar un examen escrito sobre los temas tratados.

**REQUERIMIENTOS PARA EL CURSADO**

Conocimientos en teoría de la medida y análisis funcional, transformada de Fourier. Topología general. Conocimientos básicos de geometría diferencial.



Universidad  
Nacional  
de Córdoba



Facultad de Matemática,  
Astronomía, Física y  
Computación

EXP-UNC 0058325/2019

Anexo de la RCD FAMAF 413/2019, página 3 de 33

<b>TÍTULO:</b> Biología matemática			
<b>AÑO:</b> 2020	<b>CUATRIMESTRE:</b> 1°	<b>N° DE CRÉDITOS:</b> 3	<b>VIGENCIA:</b> 3 años
<b>CARGA HORARIA:</b> 60 horas de teoría, 60 horas de práctica			
<b>CARRERA/S:</b> Doctorado en Matemática, Doctorado en Física, Doctorado en Ciencias de la Computación			

### FUNDAMENTOS

El curso estará orientado a desarrollar en los estudiantes una capacidad efectiva para investigar en temas de considerable interés actual en biofísica, ecología y matemática biológica.

Las herramientas matemáticas y conceptuales a presentarse serán de utilidad para que el estudiante aprenda a desarrollar modelos y a trabajar con los mismos. En particular, otorgaría al estudiante una robusta base teórica para el análisis de problemas de interés neurocientífico y biológico/ecológico en general.

### OBJETIVOS

Al finalizar el curso, los estudiantes estarán en condiciones de entender buena parte de la bibliografía biomatemática actual, de realizar cálculos sobre problemas de dinámica de poblaciones, dinámica de epidemias y fenómenos de crecimiento, entre otros, y de participar activamente en reuniones científicas sobre temáticas afines a las presentadas en el curso.

### PROGRAMA

#### Unidad 1: Dinámica de poblaciones I (una especie).

Introducción. Ecuaciones de diferencias de primer orden. Su análisis y linealización. Modelos de tiempo discreto de primer orden, lineales y no lineales; dinámica de las poblaciones de insectos. Ecuación de Hassell. Modelos basados en ecuaciones diferenciales. Ecuación logística. Su linealización. Linealización de sistemas de dos ecuaciones diferenciales ordinarias. Estados de equilibrio. Criterio de Routh-Hurwitz. Aspectos evolucionarios. Dinámica de las cosechas y la pesca. Metapoblaciones. Efectos de retardo. Modelos con atraso en fisiología: enfermedades con dinámica periódica. Los conejos de Fibonacci. Poblaciones estructuradas por edad en la descripción de tiempo discreto. Matrices de Leslie. Ecuación de renovación de Euler. Enfoque de McKendrick.

#### Unidad 2: Dinámica de poblaciones II (especies interactuantes).

Interacción anfitrión – parasitoide. Sistemas de ecuaciones de diferencias no lineales. Estados de equilibrio. Condiciones de Jury. Las ecuaciones de Lotka-Volterra para el predador y la presa. Modelado de la respuesta funcional del predador. Modelo de Rozenzweig-MacArthur. Forma de Kolmogorov. Competición – el principio de exclusión competitiva. Plano de fase. Teorema de Poincaré-Bendixon. Modelado de ecosistemas. Metapoblaciones interactuantes. Coexistencia de competidores mediada por el predador. Implicaciones ecológicas - Efecto de la destrucción del hábitat.

SH



Universidad  
Nacional  
de Córdoba



Facultad de Matemática,  
Astronomía, Física y  
Computación

EXP-UNC 0058325/2019

Anexo de la RCD FAMAF 413/2019, página 4 de 33

**Unidad 3: Dinámica de las enfermedades infecciosas.**

Introducción. Modelos epidémicos simples y aplicaciones prácticas. Cociente reproductivo básico. Modelado de enfermedades venéreas. Epidemia tipo SIR. Endemia tipo SIR. Erradicación y control – vacunación contra una epidemia tipo SIR. Poblaciones estructuradas por edades. Estados estacionarios. Enfermedades transmitidas por vectores. Modelo básico de las enfermedades macroparasíticas. Aspectos evolucionarios.

**Unidad 4: Difusión en biología.**

Teorías macro y microscópicas. Teoría macroscópica del movimiento. Conceptos de campo y operadores diferenciales vectoriales. Movimiento dirigido o taxis. Ecuaciones de estado estacionario y tiempos de tránsito. Ecuación de difusión y ejemplos. Distribución vertical del plankton. Búsqueda de bacterias por macrófagos. Ecuación de Fisher-Kolmogorov. Difusión con fuentes. Invasiones biológicas. Ejemplos. Solución de onda viajera a las ecuaciones de reacción-difusión. Modelo de Skellam. Propagación espacial de las epidemias. Dependencia con la capacidad de carga local.

**Unidad 5: Formación de patrones espaciales.**

Introducción. Rol de los patrones en biología. Mecanismos de reacción-difusión. Inestabilidad de Turing. Bifurcaciones de Turing. Sistemas activador-inhibidor. Condiciones para la inestabilidad de Turing. Activación de corto alcance e inhibición de largo alcance. Discusión crítica. Bifurcaciones. Efectos del tamaño de dominio sobre las bifurcaciones. Incorporación del movimiento biológico.

**Unidad 6: Modelado del cáncer.**

Introducción. Las etapas del cáncer. Modelos fenomenológicos: logístico, de von Bertalanffy, de Gompertz. Justificación de la ecuación macroscópica. Nutrientes: crecimiento limitado por difusión. Problemas de contorno móvil. Promotores e inhibidores del crecimiento. Vascularización.

**PRÁCTICAS**

Cada unidad tendrá asociada una guía de problemas que serán discutidas en las horas de práctico. Adicionalmente se deberá resolver numéricamente algún modelo relacionado con la temática del curso. Este trabajo computacional será también evaluado.

**BIBLIOGRAFÍA**

**BIBLIOGRAFÍA BÁSICA**

N.F. Britton, "Essential Mathematical Biology" (Springer, Londres, 2003).

**BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA**

J.D. Murray, "Mathematical Biology", 3ra edición, tomos I y II (Springer, Nueva York, 2002).

H.C. Berg, "Random Walks in Biology" (Princeton U. Press, Princeton, 1993).

D. Wodarz y N.L. Komarova, "Computational Biology of Cancer" (World Scientific, Singapur,

M  
JP



Universidad  
Nacional  
de Córdoba



Facultad de Matemática,  
Astronomía, Física y  
Computación

EXP-UNC 0058325/2019

Anexo de la RCD FAMAF 413/2019, página 5 de 33

2005).

P. Turchin, "Complex Population Dynamics: A Theoretical/Empirical Synthesis" (Princeton U. Press, Princeton, 2003).

L. Edelshtein-Keshet, "Mathematical Models in Biology" (SIAM, New York 2005).

Se usarán, además, artículos aparecidos recientemente en revistas científicas.

#### MODALIDAD DE EVALUACIÓN

##### CONDICIONES PARA OBTENER LA REGULARIDAD

##### EXÁMENES PARCIALES

Aprobación de los dos exámenes parciales. Habrá una instancia de recuperación.

##### TRABAJOS PRÁCTICOS

Entrega y aprobación del trabajo práctico especial en las fecha establecida.

##### CONDICIONES PARA LA APROBACIÓN

Aprobación del examen final. El examen será escrito en todos los casos y, cuando se lo juzgue necesario, habrá una instancia oral.

#### REQUERIMIENTOS PARA EL CURSADO

Conocimientos relativamente avanzados de análisis matemático (solución de ecuaciones diferenciales) y básicos de programación (solución de ecuaciones de diferencias).

MS  
SP

EXP-UNC 0058325/2019

Anexo de la RCD FAMAFA 413/2019, página 6 de 33

<b>TÍTULO:</b> Computación en la nube			
<b>AÑO:</b> 2020	<b>CUATRIMESTRE:</b> 1°	<b>N° DE CRÉDITOS:</b> n.c.	<b>VIGENCIA:</b> 3 años
<b>CARGA HORARIA:</b> 32 horas de teoría, 32 horas de práctica			
<b>CARRERA/S:</b> no corresponde			

<b>FUNDAMENTOS</b>
La brecha entre tecnología de información (TI) en la nube y estudiantes, investigadores y profesionales capacitados y preparados para adaptarse a esta nueva tendencia, que esencialmente abstrae infraestructura para ofrecerla como un servicio, sigue en aumento, así como la adopción de TI en la nube. De hecho, el crecimiento anual compuesto de la última es de más del 20%.

<b>OBJETIVOS</b>
<p>El curso está dirigido a estudiantes de posgrado que deseen tener una comprensión general de los conceptos de informática en la nube, independiente de las funciones técnicas específicas. En este curso, se proporciona información detallada acerca de los conceptos de nube, servicios principales, seguridad, arquitectura, precios y soporte, en particular de Amazon Web Services (AWS). También se explica el uso gratuito de AWS Educate, del cual FaMAF también es parte, para uso gratuito de recursos de AWS para estudiantes, profesores e investigadores de FaMAF, tales como subsidios de investigación.</p> <p>Al finalizar este curso, los estudiantes podrán hacer lo siguiente:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Describir las seis ventajas de la informática en la nube.</li> <li>• Describir los tres modelos de implementación en la nube.</li> <li>• Usar el marco de adopción de la nube para ayudar a organizaciones a transformar su forma de trabajar.</li> <li>• Comprender la filosofía de precios de AWS.</li> <li>• Revisar las características fundamentales de los precios.</li> <li>• Comprender los elementos del costo total de propiedad.</li> <li>• Comprender las diferencias entre regiones, zonas de disponibilidad y ubicaciones de borde de AWS.</li> <li>• Comprender los diferentes servicios de informática de AWS.</li> <li>• Describir Amazon Elastic Compute Cloud.</li> <li>• Explicar AWS Lambda, es decir, la informática sin servidores.</li> <li>• Describir AWS Elastic Beanstalk.</li> <li>• Analizar los servicios de almacenamiento, incluidos Amazon EBS, Amazon S3, Amazon EFS y Amazon Glacier.</li> <li>• Describir casos de uso de las opciones de almacenamiento y realizar una demostración de Amazon Glacier.</li> <li>• Comprender los precios de almacenamiento.</li> <li>• Comprender las redes virtuales en la nube con Amazon VPC.</li> <li>• Crear firewalls virtuales con grupos de seguridad.</li> <li>• Asegurar la entrega de datos, videos, aplicaciones y API con Amazon CloudFront.</li> <li>• Proporcionar información general sobre los diferentes servicios de bases de datos en</li> </ul>

AS  
AH



Universidad  
Nacional  
de Córdoba



Facultad de Matemática,  
Astronomía, Física y  
Computación

EXP-UNC 0058325/2019

Anexo de la RCD FAMAF 413/2019, página 7 de 33

la nube.

- Resaltar las diferencias entre las soluciones de base de datos administradas y no administradas.
- Diferenciar las bases de datos de lenguaje de consulta estructurada (SQL) de las bases de datos NoSQL.
- Revisar las diferencias de disponibilidad de las soluciones de bases de datos alternativas.
- Aprender a distribuir el tráfico en las instancias de Amazon EC2 mediante Elastic Load Balancing.
- Descubrir la capacidad de Auto Scaling para lanzar servidores en respuesta a cambios en la carga de trabajo.
- Utilizar CloudWatch para monitorizar recursos y aplicaciones de AWS en tiempo real.
- Describir el modelo de responsabilidad compartida de AWS.
- Examinar usuarios, grupos y roles de IAM.
- Describir los diferentes tipos de credenciales de seguridad.
- Revisar las comprobaciones de AWS Trusted Advisor.
- Analizar la conformidad de las normas de seguridad.
- Comprender las prácticas recomendadas desde día 1 con una nueva cuenta de AWS.
- Explorar los pilares de la buena arquitectura y los principios de diseño.
- Comprender la fiabilidad y la alta disponibilidad.
- Describir el impacto comercial de las decisiones de diseño.
- Describir cómo configurar una estructura organizativa para simplificar la facturación y la visibilidad de la cuenta.
- Identificar opciones y características alternativas de soporte

## PROGRAMA

### Unidad 1: Introducción.

Conceptos básicos de la nube de AWS Academy. Información general y objetivos del curso. Creación de una cuenta en el portal de AWS Training. Acceso al material del curso.

### Unidad 2: Conceptos de la nube.

¿Qué es la informática en la nube?. Las seis ventajas de la informática en la nube. ¿Qué es Amazon Web Services [AWS]?. Marco de adopción de la nube de AWS [CAF]. Conceptos de la nube.

### Unidad 3: Economía de la nube.

Aspectos fundamentales de los precios. Costo total de propiedad.

### Unidad 4: Infraestructura global de AWS.

Infraestructura global de AWS. Información general sobre el servicio y la categoría de servicio de AWS.

### Unidad 5: Servicios principales de AWS.

Informática: Introducción a Amazon Elastic Compute Cloud [EC2]. Introducción a AWS

AS  
H



Universidad  
Nacional  
de Córdoba



Facultad de Matemática,  
Astronomía, Física y  
Computación

EXP-UNC 0058325/2019

Anexo de la RCD FAMAF 413/2019, página 8 de 33

Lambda (computación sin servidores). Introducción a AWS Elastic Beanstalk.  
Almacenamiento: Amazon Elastic Block Store (EBS). Amazon Simple Storage Service (S3).  
Amazon Elastic File System (EFS). Amazon Glacier.  
Redes Virtuales en la Nube (VPC): Grupos de seguridad de Amazon VPC. Amazon CloudFront.

**Unidad 6: Bases de datos.**

Amazon Relational Database Service (RDS). Amazon DynamoDB (bases de datos no-SQL).  
Amazon Redshift (data warehouse, Big Data). Amazon Aurora.

**Unidad 7: Balanceo, escalado y monitorización.**

Elastic Load Balancing (ELB). Amazon CloudWatch. Auto Scaling.

**Unidad 8: Seguridad en la nube.**

Modelo de responsabilidad compartida de AWS. AWS Identity and Access Management (IAM).  
AWS Trusted Advisor. AWS CloudTrail. AWS Config. Revisión de las prácticas recomendadas  
de AWS que deben aplicarse desde el primer día. Programas de seguridad y conformidad de  
AWS. Recursos de seguridad de AWS.

**Unidad 9: Arquitectura en la nube.**

Principios de diseño de buena arquitectura. Significado de fiabilidad y alta disponibilidad.  
Transición de un centro de datos a la nube.

**Unidad 10: Soporte en la nube.**

Introducción a AWS Organizations. Información general sobre los planes y los costos del  
soporte técnico de AWS. Facturación y soporte en la nube.

**PRÁCTICAS**

Laboratorios (presentaciones y discusiones presenciales), asignación de lectura, ejercicios.  
Supervisión: presencial. Evaluación: completar todos los ejercicios y laboratorios.

**BIBLIOGRAFÍA**

Materiales de las lecciones preparados para el curso. Ejercicios de laboratorio. Soluciones de  
ejemplo

**MODALIDAD DE EVALUACIÓN**

Regularidad: 70% de asistencia a las clases teóricas y prácticas, completar los laboratorios y  
asignaciones. Evaluación final: un exámen de 65 preguntas en 90 minutos.

**REQUERIMIENTOS PARA EL CURSADO**

Conocimiento técnico general de tecnología de la información (informática).

MS  
SH



Universidad  
Nacional  
de Córdoba



Facultad de Matemática,  
Astronomía, Física y  
Computación

EXP-UNC 0058325/2019

Anexo de la RCD FAMAF 413/2019, página 9 de 33

<b>TÍTULO:</b> Computación paralela			
<b>AÑO:</b> 2020	<b>CUATRIMESTRE:</b> 1°	<b>N° DE CRÉDITOS:</b> 3	<b>VIGENCIA:</b> 3 años
<b>CARGA HORARIA:</b> 60 horas de teoría, 60 horas de práctica			
<b>CARRERA/S:</b> Doctorado en Astronomía, Doctorado en Física, Doctorado en Ciencias de la Computación			

<b>FUNDAMENTOS</b>
La tecnología de los microprocesadores modernos contiene un alto nivel de paralelismo. Para poder utilizar eficientemente estas arquitecturas se deben conocer los modelos de ejecución y las formas de sacar provecho a este paralelismo.

<b>OBJETIVOS</b>
Que el estudiante comprenda las tres dimensiones de paralelismo que actualmente posee una arquitectura de microprocesador: paralelismo de instrucciones (ILP), de datos (DLP) y de hilos (TLP), tanto en sus variantes de CPU como de GPU. Comprender las soluciones de compromiso de cada una de estas arquitecturas para obtener alto desempeño tanto en cálculo como en acceso a memoria. Saber discernir si un proceso está realizando un uso adecuado de todas las capacidades de la máquina. Al final de la materia los estudiantes deben ser capaces de adaptar programas a fin de utilizar estas tres dimensiones del paralelismo, tanto en CPU como en GPU.

<b>PROGRAMA</b>
<p><b>Unidad 1: Introducción.</b>                  Escalado. Leyes de: Amdahl, Gustafson, Little. Eficiencia.                  Factores que degradan el desempeño: inanición, latencia, sobrecarga, contención.                  Paralelización: descomposición en tareas, orden y agrupamiento de tareas, descomposición de datos, datos compartidos.                  Sincronización: condiciones de carrera, instrucciones atómicas. Primitivas de sincronización: mutexes, spinlocks, semáforos, barreras y fences.                  Predicción de desempeño: modelo roofline. Medición de desempeño.</p> <p><b>Unidad 2: CPU.</b>                  Paralelismo de instrucción (ILP): pipelining, procesadores superescalares, ejecución fuera de orden, SMT.                  Memoria: jerarquía y asociatividad de cache, alineamiento de memoria, algoritmos cache-aware y cache-oblivious. Memoria virtual: efectos de la TLB en el desempeño. Memoria distribuida: NUMA, coherencia de cache. Afinidad de memoria y pinning de hilos a cores.                  Vectorización: unidades SIMD, SSE intrinsics, técnicas de vectorización.                  OpenMP: constructores work-sharing, atributos para compartir datos, planificadores, sincronización, entorno de ejecución, compilación.                  Aplicaciones: extensiones ISA específicas para aplicaciones, bibliotecas para HPC.</p> <p><b>Unidad 3: GPU.</b>                  Arquitectura interna.                  Limitaciones de la GPGPU: serialización de saltos, ocultamiento de latencia, ocupación.</p>

SH



Universidad  
Nacional  
de Córdoba



Facultad de Matemática,  
Astronomía, Física y  
Computación

EXP-UNC 0058325/2019

Anexo de la RCD FAMAF 413/2019, página 10 de 33

Jerarquía de memoria, cache de software vs. cache de hardware, unidades de textura.  
CUDA: mapeo hilo-dato, lanzamiento de kernels, comunicación host-device, sincronización, contadores de desempeño y profiling, manejo de errores, compute capabilities, PTX ISA.  
Optimización: aumento de la granularidad de los hilos, uso efectivo de la memoria compartida, código sin saltos, double buffering, reducción del uso de registros, aritmética de precisión mixta, cómo evitar instrucciones atómicas.  
Ejemplos de algoritmos GPU: reducción, scan segmentado, compactación de streams, usos.  
Bibliotecas: CUBLAS, CUFFT, CUSPARSE, Thrust, CUDPP, CUB.

### PRÁCTICAS

Clases de laboratorio con exposición de temas puntuales y trabajo en grupo donde en lo posible se intenta combinar diferentes perfiles de formación.

### BIBLIOGRAFÍA

B. Chapman, G. Jost, R. van der Pas, Using OpenMP: Portable Shared Memory Parallel Programming, 2007.  
D. B. Kirk, Wen-mei W. Hwu, Programming Massively Parallel Processors, 2nd edition, 2012.  
NVIDIA Inc., CUDA C Programming Guide, versión CUDA 9.1, 2017.  
NVIDIA Inc., CUDA C Best Practices, versión CUDA 9.1, 2017.  
NVIDIA Inc., PTX ISA 6.1, versión CUDA 9.1, 2017.  
J. Hennessy, D. Patterson, Computer Architecture: A Quantitative Approach, 5th edition, Morgan Kaufmann, 2011.  
J. Hennessy, D. Patterson, Computer Organization and Design: The hardware / Software Interface, 5th edition, Morgan Kaufmann, 2013.

### MODALIDAD DE EVALUACIÓN

El alumno deberá elegir un programa de computación numérica intensiva que será paralelizado de cuatro formas:

1. ILP, cache-aware.
2. SIMD (instrucciones vectoriales).
3. Multicore (típicamente OpenMP para CPU).
4. Manycore (típicamente CUDA para GPU).

Se deberá entregar un informe final donde se comparen las mejoras obtenidas. En el primer punto se deberá analizar la mejor utilización de las unidades de ejecución, y la mejora en las tasas de cache-hit. En el segundo caso, la mejora que se obtuvo al operar de manera vectorial sobre los datos y la estrategia de paralelización utilizada, así como un análisis de scaling respecto al ancho de la unidad vectorial (AVX vs AVX512). Para multicore CPU además de analizar el scaling con respecto a la cantidad de cores, se deberá informar sobre los efectos de la afinidad de memoria-cpu. Finalmente para manycore GPU se harán análisis de weak-scaling y de utilización del ancho de banda de memoria y potencia de cálculo respecto al pico teórico.

### REQUERIMIENTOS PARA EL CURSADO

Conocimientos de programación numérica.

RS  
SH



Universidad  
Nacional  
de Córdoba



Facultad de Matemática,  
Astronomía, Física y  
Computación

EXP-UNC 0058325/2019

Anexo de la RCD FAMAF 413/2019, página 11 de 33

<b>TÍTULO:</b> Dispersión inelástica de rayos X			
<b>AÑO:</b> 2020	<b>CUATRIMESTRE:</b> 1°	<b>N° DE CRÉDITOS:</b> 3	<b>VIGENCIA:</b> 3 años
<b>CARGA HORARIA:</b> 60 horas de teoría, 15 horas de práctica			
<b>CARRERA/S:</b> Doctorado en Física			

### FUNDAMENTOS

La espectroscopía por dispersión inelástica de rayos X constituye una herramienta moderna para investigar estructura y excitaciones de sistemas electrónicos en la materia condensada. La particularidad que caracteriza a esta técnica, como consecuencia de estar basada en un proceso de dispersión electrón-fotón, es la de permitir el acceso al análisis tanto energético como direccional de los fotones dispersados, ofreciendo así la posibilidad de estudiar aspectos fundamentales de un sistema de electrones, como la dinámica de excitaciones de electrones de valencia y de coraza, la densidad de estados electrónicos desocupados, excitaciones elementales en sólidos, propiedades electrónicas de estado fundamental, etc. El surgimiento de fuentes intensas de radiación X, como los sincrotrones de tercera generación en las últimas dos décadas, ha sido decisivo para el desarrollo de esta técnica. La disponibilidad en Sudamérica de un laboratorio que constituye una facilidad experimental internacional (LNLS, Campinas, Brasil), y cuya potencialidad se verá incrementada sustancialmente en breve con la nueva fuente de radiación SIRIUS, ha dado un gran impulso al desarrollo de la técnica en nuestra región. La necesidad de formar recursos humanos con capacidad para plantear nuevos experimentos en este campo es una de las motivaciones para el dictado del presente curso.

### OBJETIVOS

El curso está organizado para proveer un panorama amplio sobre la espectroscopía por dispersión inelástica de rayos X, partiendo de los fundamentos de la interacción electrón-fotón y finalizando con la discusión de tópicos modernos en aplicaciones de la técnica. Se hará particular énfasis en el análisis de los diferentes regímenes de la dispersión inelástica de rayos X, en la información específica que cada tipo de experimento es capaz de suministrar y en las metodologías experimentales involucradas. El objetivo general del curso es capacitar al estudiante de doctorado para poder planificar un experimento de dispersión inelástica de rayos X, procesar los datos experimentales e interpretar los resultados obtenidos.

### PROGRAMA

#### Unidad 1: Fundamentos de la dispersión inelástica de rayos X.

Fundamentos teóricos de la interacción electrón-fotón. Probabilidad de transición. Cuantización del campo de radiación. Interacción entre el campo de radiación y partículas cargadas. Procesos de dispersión de fotones por electrones. Sección eficaz en primer y segundo orden de teoría de perturbaciones. Resonancias en la sección eficaz.

#### Unidad 2: Dispersión Compton.

Régimen Compton de la dispersión inelástica de rayos X. Aproximación de colisión impulsiva. Sección eficaz. Perfil Compton. Distribución de momento electrónico. Instrumentación. Requerimientos experimentales. Espectrómetros Compton. Ejemplos de aplicación de la espectrometría Compton en la materia condensada.

AS



Universidad  
Nacional  
de Córdoba



Facultad de Matemática,  
Astronomía, Física y  
Computación

EXP-UNC 0058325/2019

Anexo de la RCD FAMAF 413/2019, página 12 de 33

**Unidad 3: Dispersión por excitación de electrones de valencia.**

Régimen colectivo de la dispersión inelástica de rayos X. Sección eficaz. Factor de estructura dinámico. Excitación colectiva e individual de electrones de valencia en sólidos. Instrumentación. Requerimientos experimentales. Ejemplos de aplicación al estudio de la dinámica electrónica en sólidos.

**Unidad 4: Dispersión por excitación de electrones de coraza.**

Régimen de excitación de electrones de coraza atómica o dispersión Raman de rayos X (XRS). Sección eficaz. Relación con la sección eficaz de absorción de rayos X. Instrumentación. Requerimientos experimentales. Ejemplos de aplicación.

**Unidad 5: Dispersión inelástica resonante.**

Régimen resonante de la excitación de electrones de coraza atómica (RIXS) o dispersión Raman resonante de rayos X. Sección eficaz en el régimen resonante. Instrumentación. Requerimientos experimentales. Ejemplos de aplicación.

**Unidad 6: Tópicos modernos en IXS.**

Experimentos en condiciones extremas (materiales bajo alta presión). Experimentos in situ/in operando. Experimentos con resolución temporal ("pump and probe"). Tomografía por XRS: Imágenes de rayos X con contraste químico. Experimentos RIXS con alta resolución. Experimentos con radiación circularmente polarizada: Dicroísmo circular magnético en XRS.

**PRÁCTICAS**

Las actividades prácticas consistirán en la resolución de problemas relacionados con el contenido teórico de la materia. Se prevén clases de consultas semanales. La evaluación de las actividades prácticas consistirá en problemas tipo deber. Su aprobación será necesaria para regularizar el curso.

**BIBLIOGRAFÍA**

Electron Dynamics by Inelastic X-Ray Scattering, W. Schülke (Oxford University Press, 2007).  
Interactions of Photons and Neutrons with Matter, S.-H. Chen y M. Kottlarchyk (World Scientific, 2007).  
Atoms and Molecules, M. Weissbluth (Academic Press, 1978).  
X-Ray Compton Scattering, M.J. Cooper, P.E. Mijnarends, N. Shiotani, N. Sakai, A. Bansil (Eds.) (Oxford University Press, 2004).

**MODALIDAD DE EVALUACIÓN**

Para obtener la regularidad del curso: cumplir un mínimo de 70% de asistencia a las clases y aprobación de problemas tipos deber.  
Para aprobar el curso: aprobación de un examen oral y escrito sobre los contenidos teóricos y prácticos del curso.

**REQUERIMIENTOS PARA EL CURSADO**

Conocimientos sobre interacción de la radiación X con la materia. Conocimientos avanzados de mecánica cuántica. Conocimientos de física del estado sólido.

Handwritten initials or signature.



Universidad  
Nacional  
de Córdoba



Facultad de Matemática,  
Astronomía, Física y  
Computación

EXP-UNC 0058325/2019

Anexo de la RCD FAMAF 413/2019, página 13 de 33

<b>TÍTULO:</b> Introducción a la geometría simpléctica			
<b>AÑO:</b> 2020	<b>CUATRIMESTRE:</b> 1°	<b>N° DE CRÉDITOS:</b> 3	<b>VIGENCIA:</b> 3 años
<b>CARGA HORARIA:</b> 60 horas de teoría, 30 horas de práctica			
<b>CARRERA/S:</b> Doctorado en Matemática			

<b>FUNDAMENTOS</b>
La geometría simpléctica es una rama de la geometría diferencial y la topología diferencial que estudia las variedades simplécticas; es decir, variedades diferenciables equipadas con una 2-forma cerrada, no degenerada. La geometría simpléctica tiene su origen en la formulación hamiltoniana de la mecánica clásica, donde el espacio de fase de ciertos sistemas clásicos adquiere la estructura de una variedad simpléctica.

<b>OBJETIVOS</b>
La meta del curso es introducir al estudiante en nivel de doctorado a la geometría simpléctica y sus aplicaciones, en particular a la mecánica Hamiltoniana.

<b>PROGRAMA</b>
<b>Unidad 1: Álgebra lineal simpléctica.</b> Formas simplécticas, complementos ortogonales en el espacio dual, complementos ortogonales para una forma bi-lineal, subespacio isotrópico, forma estándar de la forma simpléctica, el Grassmanniano Lagrangiano, grupo lineal simpléctico, formas Hermitianas.
<b>Unidad 2: Variedades simplécticas. Estructura simpléctica en fibrados cotangentes.</b> Variedades simplécticas, el fibrado cotangente, variedad simpléctica reducida, variedades proyectivas complejas, estructura casi compleja, clases de cohomología.
<b>Unidad 3: Simplectomorfismos.</b> Subvariedades Lagrangianas, flujo geodésico.
<b>Unidad 4: Teoremas locales.</b> Teorema de Moser, teorema de Darboux, teorema del entorno tubular de Weinstein.
<b>Unidad 5: Mecánica Hamiltoniana: campos vectoriales Hamiltonianos.</b> Flujos de campos vectoriales, derivados de Lie, campos vectoriales hamiltonianos, corchetes de Poisson, estructuras de Poisson.
<b>Unidad 6: La función momento.</b> Acciones de grupo hamiltonianas, función momento, acción adjunta.
<b>Unidad 7: Transformada de Legendre.</b> Condición de Legendre, curva estacionaria, mecánica clásica.

<b>PRÁCTICAS</b>
Los alumnos deberán presentar a lo largo del cuatrimestre una lista de ejercicios resueltos seleccionados bajo la supervisión del profesor.

AS  
SH



Universidad  
Nacional  
de Córdoba



Facultad de Matemática,  
Astronomía, Física y  
Computación

EXP-UNC 0058325/2019

Anexo de la RCD FAMAF 413/2019, página 14 de 33

#### **BIBLIOGRAFÍA**

1. A. Cannas da Silva, Lectures on Symplectic Geometry.
2. R. Abraham and J. Marsden, Foundations of Mechanics.
3. V. I. Arnold, Mathematical methods of classical mechanics, Graduate Texts in Mathematics 60. Springer- Verlag, New York 1989.

#### **MODALIDAD DE EVALUACIÓN**

El examen final constará de una evaluación escrita/oral sobre contenidos prácticos y una evaluación escrita/oral sobre contenidos teóricos.

#### **REQUERIMIENTOS PARA EL CURSADO**

Geometría diferencial, álgebra lineal.

Handwritten marks: a triangle and the letters 'FH'.



EXP-UNC 0058325/2019

Anexo de la RCD FAMAF 413/2019, página 15 de 33

<b>TÍTULO:</b> Microcontroladores - Sistemas embebidos			
<b>AÑO:</b> 2020	<b>CUATRIMESTRE:</b> 1°	<b>N° DE CRÉDITOS:</b> 3	<b>VIGENCIA:</b> 3 años
<b>CARGA HORARIA:</b> 60 horas de teoría, 60 horas de práctica			
<b>CARRERA/S:</b> Doctorado en Física, Doctorado en Ciencias de la Computación			

<p><b>FUNDAMENTOS</b></p> <p>Los avances en tecnologías tales como la fabricación de circuitos integrados CMOS, sistemas micro-electromecánicos (MEMs), y sistemas de comunicación por radio frecuencia (RF), han revolucionado la concepción tradicional que tenían los sistemas computacionales y las redes de información. La extraordinaria reducción en el tamaño y el consumo de los circuitos electrónicos actuales, permite que dispositivos con capacidades de procesamiento y comunicación encuentren todos los días nuevas áreas de aplicación. Este contexto ha dado lugar a la formación de nuevas áreas de investigación, conocidas bajo el nombre de "computación ubicua", y más recientemente rebautizadas bajo el nombre de "Internet de las cosas" (IoT, Internet of Things). En el terreno práctico, la IoT es entendida como la integración de la informática en el entorno de la persona y los procesos, de forma que los sistemas computacionales no se perciban como objetos diferenciados. Consiste en la creación de una serie de objetos de uso cotidiano con cualidades interactivas no invasivas, y su objetivo básico es el dotar a estos objetos de capacidades de adquisición de información (tanto del entorno físico como del estado actual del objeto), procesamiento y comunicación, de tal forma que puedan comunicarse entre ellos y ofrecer nuevos servicios a sus usuarios.</p> <p>Las plataformas más utilizadas en el desarrollo de este tipo de dispositivos son las basadas en sistemas embebidos (SE): dispositivos electrónicos compactos y autónomos, con capacidad de cómputo, que realizan procesamiento de datos y/o control sobre variables físicas externas. La mayor diferencia que presenta un SE, respecto de una computadora personal (PC), es que un SE está dedicado a una función particular para la cual fue desarrollado, mientras que un PC está concebido para usos múltiples. Además, los recursos de hardware que dispone un SE son generalmente más reducidos y deben afrontar importantes restricciones de consumo.</p> <p>Los sistemas embebidos forman parte activa en la solución de problemas reales, en campos tan diversos como la industria, la robótica, la medicina, las telecomunicaciones, etc. El mundo físico se basa en variables análogas las cuales se deben convertir en forma digital para ser procesadas y poder controlar diferentes tipos de procesos. En este sentido la instrumentación científica no está exenta de transformaciones ante estos cambios de paradigma. Es importante que el profesional científico y técnico esté familiarizado con este tipo de tecnología, ya que le abre un campo nuevo para dar soluciones a medida en su entorno de trabajo, mediante sistemas electrónicos de bajo costo, con capacidad de adquisición y generación de señales de gran exactitud y precisión.</p>
--

<p><b>OBJETIVOS</b></p> <p><b>OBJETIVO GENERAL</b></p> <p>Que el alumno sea capaz de abordar el diseño e implementación del software específico de sistemas embebidos de tiempo real sobre una plataforma de microcontroladores, orientados al desarrollo de sistemas de control de procesos e instrumentación científica.</p>
--

*Handwritten initials/signature.*



Universidad  
Nacional  
de Córdoba



Facultad de Matemática,  
Astronomía, Física y  
Computación

EXP-UNC 0058325/2019

Anexo de la RCD FAMAF 413/2019, página 16 de 33

#### OBJETIVOS ESPECÍFICOS

Conocer arquitecturas actuales de microcontroladores y el funcionamiento de los principales bloques de periféricos e interface.

Utilizar lenguajes estructurados en el desarrollo de aplicaciones de sistemas embebidos, atendiendo criterios de reutilización y portabilidad de código.

Reconocer la necesidad de implementación de sistemas de tiempo real.

Introducir al alumno en la utilización de sistemas operativos en tiempo real para el desarrollo de aplicaciones de mediana/alta complejidad.

Realizar prácticas de laboratorio y proyectos de control e instrumentación sobre plataformas reales, a fin de afianzar los conocimientos adquiridos.

#### PROGRAMA

##### **Unidad 1: Introducción a los sistemas embebidos.**

Definición. Importancia. Términos y límites. Áreas de aplicación. Características. Requerimientos. Fases de diseño.

##### **Unidad 2: Plataformas de sistemas embebidos.**

Arquitecturas de microcontroladores de 16 y 32 bits. Arquitectura ARM Cortex M (32 bits). Concepto de Systems on-chip (SoC). Mapeo de memoria. Bloques generadores de sincronismos (CLKs). Reset e interrupciones. Buses de periféricos. DMA. Modos de bajo consumo.

##### **Unidad 3: Desarrollo de firmware.**

Repaso de lenguaje C. Recursos del lenguaje C para sistemas embebidos. Compiladores. El preprocesador y directivas del compilador. Uso de manejo de bits mediante máscaras. Tipos de datos. Tipos de variables. Constantes. Arreglos, estructuras y uniones. Conceptos avanzados sobre funciones, parámetros por referencia y punteros a funciones. Implementación de rutinas de servicio de interrupciones (ISR).

##### **Unidad 4: Manejo de módulos periféricos.**

Puertos de entrada/salida (GIPO): estructura básica, registros asociados, uso mediante "pooling" e interrupción. Utilización del TIMER como generador de base de tiempos. Módulos de comparación y captura. Modulación PWM. Conversores A/D: estructura básica, configuración y modos de uso. Comunicación serial: UART, I2C, SPI.

##### **Unidad 5: Organización del código.**

Organización del código. Desarrollo mediante capas de abstracción: App, BSP, HAL. Modelado de librerías de manejo de hardware (HAL).

##### **Unidad 6: Sistemas de tiempo real.**

Conceptos de tiempo real. Definición. Multitarea en pequeños sistemas embebidos. Recursos de hardware asociados. Soluciones de compromiso. Terminología. Ejemplos de aplicación. Restricciones de tiempo: tiempo límite, tiempo de ejecución, tiempo de respuesta, jitter, etc.

AS  
SP



Universidad  
Nacional  
de Córdoba



Facultad de Matemática,  
Astronomía, Física y  
Computación

EXP-UNC 0058325/2019

Anexo de la RCD FAMAF 413/2019, página 17 de 33

### **Unidad 7: Sistemas operativos de tiempo real (RTOS).**

Tarea, algoritmos de planificación (cooperativos / preemptivos), kernel, TBC, servicios. Gestión de memoria heap: asignación dinámica de memoria. Gestión de tareas: estado de tareas, prioridades, la tarea idle. FreeRTOS: servicios API para gestión de tareas. Delays. Colas (Queue): compartiendo datos entre tareas. Acceso (bloqueante / no bloqueante) desde múltiples tareas. Servicios API para la gestión de colas. Software timers (SWT): usos, atributos, estados y eventos. Funciones Callback. Gestión de interrupciones: servicios del RTOS para una ISR. Semáforos: tipos (binarios y contadores), usos, servicios.

### **PRÁCTICAS**

El curso es fundamentalmente práctico y se orienta a una metodología de trabajos de laboratorio. El propósito es colocar a los estudiantes en un ambiente real de diseño de sistemas embebidos. Para ello se hará uso de placas de desarrollo basadas en microcontroladores ARM Cortex M con módulos periféricos de adquisición de datos, comunicación y de interfaz, entre otros.

El curso se estructura alrededor de las prácticas de laboratorio y los proyectos que serán utilizados para evaluación de los alumnos. Estas prácticas buscan aplicar conceptos específicos sobre sistemas embebidos además de generar librerías de código que puedan ser utilizados en posteriores desarrollos.

### **CLASES PRÁCTICAS:**

Cuatro horas semanales. Corresponden a prácticas de laboratorio, donde se presentarán consignas y soluciones a problemas típicos de control e instrumentación, implementados mediante sistemas embebidos, haciendo uso de plataformas e instrumental disponibles en el laboratorio de electrónica. Además se coordinará la realización de un proyecto integrador hacia el final del curso, a desarrollarse en grupos de un número reducido de estudiantes.

### **BIBLIOGRAFÍA**

"Embedded Systems with Arm Cortex-M Microcontrollers in Assembly Language and C: Third Edition", Yifeng Zhu. Ed. E-Man Press LLC, 2017. ISBN: 0982692668.

"Mastering the FreeRTOS™ Real Time Kernel: A Hands-On Tutorial Guide", Richard Barry. Pre-release 161204 Edition, Real Time Engineers Ltd, 2018.

### **MODALIDAD DE EVALUACIÓN**

Los criterios de evaluación serán:

- a) La calidad de los conocimientos teóricos y prácticos adquiridos por el alumno.
- b) La Integración de conocimientos.
- c) El desarrollo de capacidades, habilidades y destrezas para el planteo y solución de problemas.
- d) Asistencia a clases y participación activa.

M  
SH

EXP-UNC 0058325/2019

Anexo de la RCD FAMAF 413/2019, página 18 de 33

#### FORMAS DE EVALUACIÓN

Los exámenes parciales serán instrumentados mediante la presentación de los trabajos prácticos y proyectos especiales de laboratorio, junto a sus informes correspondientes, realizados durante el desarrollo de la materia en las horas prácticas.

El examen final constará de la evaluación de un Trabajo Integrador, que consiste en el desarrollo de un sistema embebido de mediana complejidad, de aplicación práctica, implementado mediante la utilización de un RTOS, que resuelva un problema real. Se prevé la evaluación de su informe escrito correspondiente y una defensa oral del trabajo realizado.

#### REQUERIMIENTOS PARA EL CURSADO

Conocimientos básicos de programación en lenguaje estructurado, preferentemente "C"

Handwritten signature or initials.



Universidad  
Nacional  
de Córdoba



Facultad de Matemática,  
Astronomía, Física y  
Computación

EXP-UNC 0058325/2019

Anexo de la RCD FAMAF 413/2019, página 19 de 33

<b>TÍTULO:</b> Simetrías en relatividad general y teoría de campos			
<b>AÑO:</b> 2020	<b>CUATRIMESTRE:</b> 1°	<b>N° DE CRÉDITOS:</b> 3	<b>VIGENCIA:</b> 3 años
<b>CARGA HORARIA:</b> 60 horas de teoría, 30 horas de práctica			
<b>CARRERA/S:</b> Doctorado en Física			

<b>FUNDAMENTOS</b>
Las simetrías son un aspecto esencial en Física, y el modo en que emergen depende del área en cuestión (mecánica clásica, mecánica cuántica, teoría cuántica de campos, relatividad general). Esto puede sistematizarse en el estudio de grupos y representaciones.

<b>OBJETIVOS</b>
El objetivo de este curso es dar una introducción elemental de grupos, con énfasis en grupos de Lie matriciales, y sus distintas aplicaciones en Física.

<b>PROGRAMA</b>
<p><b>Unidad 1: Grupos y representaciones.</b>          Grupos: definición. Clases, subgrupos, subgrupos normales, cocientes, productos directos y semidirectos. Elementos de teoría de representaciones, representaciones irreducibles, descomposición de productos tensoriales de representaciones en irreducibles. Grupos clásicos. <math>O(3)</math>, <math>SO(3)</math> y su cubrimiento <math>SU(2)</math>, grupos de spin en dimensiones mayores. Espinores en mecánica cuántica. Grupo de Poincaré, <math>SO(3,1)</math> y su cubrimiento <math>SL(2,C)</math>. Espinores. Grupos de Lie: definición, campos invariantes a izquierda, álgebras de Lie. Grupos matriciales. El mapa exponencial. Relación entre grupos de Lie y su álgebra de Lie, representaciones de álgebras de Lie. Acción de grupos de Lie en variedades diferenciales: órbitas y subgrupos de isotropía. Flujo de campos vectoriales, derivada de Lie, isometrías. Transporte paralelo y grupos de holonomía.</p> <p><b>Unidad 2: Aplicaciones en física de partículas.</b>          Teoría de campos en el espaciotiempo de Minkowski, tipos de campos. Simetrías del espaciotiempo y teorema de Noether: tensor energía-momento. Simetrías internas globales y teorema de Noether: corrientes conservadas. Ruptura de simetrías globales, bosones de Goldstone. Fibrados triviales en teoría de campos en Minkowski. Simetrías internas locales (de gauge): ruptura, mecanismo de Higgs.</p> <p><b>Unidad 3: Aplicaciones en relatividad general.</b>          Revisión del concepto de derivada covariante, método de marcos móviles, ecuaciones de Cartan. Cosmologías de Bianchi. Aspectos algebraicos de espinores en RG. Bivectores y su clasificación, tipos de campos de Maxwell. Descomposición del tensor de Riemann. Clasificación de Petrov del tensor de Weyl: espacios algebraicamente especiales. Escalares de curvatura.</p>

<b>PRÁCTICAS</b>
Guías de problemas (aproximadamente 50 problemas). Consulta en horarios de oficina.

AS  
SH



Universidad  
Nacional  
de Córdoba



Facultad de Matemática,  
Astronomía, Física y  
Computación

EXP-UNC 0058325/2019

Anexo de la RCD FAMAF 413/2019, página 20 de 33

#### BIBLIOGRAFÍA

1. Lie Groups and Algebras with Applications to Physics, Geometry, and Mechanics, D.H. Sattinger y O.L. Weaver, Springer-Verlag, 1986.
2. Lie Groups, Lie Algebras, and Representations: An Elementary Introduction, Brian C Hall, Springer, 2003.
3. Geometry and Topology in Physics, M. Nakahara, IOP (2003)
4. Exact Solutions of Einstein's Field Equations (2nd ed.), Stephani, Hans; Dietrich Kramer; Malcolm MacCallum; Cornelius Hoenselaers y Eduard Herlt. Cambridge University Press, 2009.
5. General Relativity, R. Wald, Chicago University Press, 1984.

#### MODALIDAD DE EVALUACIÓN

Regularidad: entregar todos los problemas resueltos.

Aprobación: Escrito: resolución de problemas. Oral: presentación de un paper, en formato seminario.

#### REQUERIMIENTOS PARA EL CURSADO

Conocimientos básicos de geometría diferencial y relatividad general (o en su defecto geometría Riemanniana)



Universidad  
Nacional  
de Córdoba



Facultad de Matemática,  
Astronomía, Física y  
Computación

EXP-UNC 0058325/2019

Anexo de la RCD FAMAF 413/2019, página 21 de 33

<b>TÍTULO:</b> Sistemas compuestos basados en el carbono y nanoestructuras magnéticas			
<b>AÑO:</b> 2020	<b>CUATRIMESTRE:</b> 1°	<b>N° DE CRÉDITOS:</b> 3	<b>VIGENCIA:</b> 3 años
<b>CARGA HORARIA:</b> 60 horas de teoría, 40 horas de práctica			
<b>CARRERA/S:</b> Doctorado en Física			

#### FUNDAMENTOS

El objetivo general del curso es introducir las generalidades sobre materiales compuestos o híbridos constituidos por distintos alótropos del carbono y aleaciones de nanoestructuras magnéticas, tales como nanohilos y nanotubos de FeCo y NiFe. Por un lado, se estudiarán las propiedades estructurales, vibracionales, eléctricas y magnéticas del grafito, grafeno, fullerenos y nanotubos de carbono. Por otro lado, se estudiará el comportamiento magnético de nanoestructuras magnéticas y se ampliará su descripción a través de herramientas de cálculo computacional, empleando el programa OOMMF como plataforma. Luego, se sumarán ambos sistemas para explorar la presencia de nuevas propiedades combinadas.

#### OBJETIVOS

Se espera que los estudiantes logren un manejo mínimo de algunas técnicas básicas de caracterización estructural y magnética. También se busca que desarrollen habilidades para diseñar algunos experimentos sencillos de simulación micromagnética de los sistemas caracterizados experimentalmente, para complementar y consolidar los conocimientos adquiridos sobre sistemas reales, de interés en el campo de la Nanociencia y Nanotecnología.

#### PROGRAMA

##### Unidad 1: Introducción general: el carbono .

Breve reseña histórica. Características generales del carbono: Propiedades físicas y químicas. Hibridación sp, sp<sup>2</sup> y sp<sup>3</sup>. Enlaces. Formas alotrópicas del carbono y sus óxidos. Dimensionalidad. Defectos cristalinos: puntuales, lineales, planos y volumétricos. Rol del hidrógeno en las propiedades del carbono. Citotoxicidad y biocompatibilidad. Nanociencia y nanotecnología del carbono. Ejercicios.

##### Unidad 2: Sistema tri-dimensional: grafito, óxido de grafito y diamante.

Estructura cristalina del grafito vs. diamante. Características generales de los sistemas grafiticos: color, dureza, sistemas cristalinos, transparencia, pureza, solubilidad. Clasificación de los distintos grafitos: kish, cristal, pirolítico altamente orientado, nanoestructurado, natural y amorfo. Óxido de grafito. Propiedades estructurales, vibracionales, térmicas, ópticas, eléctricas y magnéticas. Métodos de obtención y producción. Aplicaciones. Ejercicios

##### Unidad 3: Sistemas bi-dimensionales: grafeno y óxido de grafeno.

Breve reseña histórica. Propiedades estructurales, vibracionales, eléctricas, electroquímicas y magnéticas. Comportamiento metálico y efecto de campo eléctrico, electrones del grafeno, fermiones Dirac sin masa, efecto Hall cuántico anómalo. Quiralidad. Terminaciones de borde: zig-zag y armchair. Rol de defectos. Óxido de grafeno y óxido de grafeno reducido: propiedades generales. Métodos de obtención y producción: micro-exfoliación mecánica, deposición química de vapor, descomposición térmica de carburo de silicio, ablación láser,

A  
SH



Universidad  
Nacional  
de Córdoba



Facultad de Matemática,  
Astronomía, Física y  
Computación

EXP-UNC 0058325/2019

Anexo de la RCD FAMAF 413/2019, página 22 de 33

decapado iónico y etching químico, sonicación, método de Hummers. Ventajas y desventajas de los distintos métodos. Dispersiones y composites de óxido de grafeno. Aplicaciones. Ejercicios.

**Unidad 4: Sistemas uni-dimensionales: nanotubos de carbono.**

Breve reseña histórica. Nanotubos de pared simple y de pared múltiple. Propiedades estructurales, vibracionales, eléctricas y magnéticas: efectos de curva y nanotubos de pequeño diámetro. Métodos de obtención y producción: descarga en arco eléctrico, ablación láser, deposición química en fase vapor, molienda de alta energía. Composites de nanotubos magnéticos. Aplicaciones. Ejercicios.

**Unidad 5: Sistema cero-dimensional: fullerenos.**

Breve reseña histórica. Clasificación de fullerenos: heterofullerenos, endohédricos, exohédricos, de estructura parcial, estructura huésped-anfitrión y de estructura abierta. HOMO y LUMO, rol de defectos, polimerización. Métodos de obtención y producción: descarga en arco eléctrico en atmósfera inerte, vaporización con láser y expansión supersónica, combustiones, naturales. Aplicaciones. Ejercicios.

**Unidad 6: Introducción a técnicas de caracterización estructural, magnética y electroquímica.**

Difracción de rayos X: difracción por un cristal, por cristales poliatómicos y redes monoatómicas con bases. Formulación de Bragg. Difracción de electrones y neutrones. Dispositivos experimentales. Difractogramas característicos de los distintos alótropos del carbono y nanoestructuras magnéticas.

Espectroscopía y microscopía Raman: Conceptos generales. Dispersión Raman Stokes y anti-Stokes. Resolución lateral y de profundidad.

Microscopía de Sonda de Barrido (SPM): Conceptos generales. Microscopía de Fuerza atómica (AFM). Modos de operación: contacto, intermitente y no-contacto. Resolución espacial y temporal. Dispositivos experimentales: sistema de detección, sensores de fuerza.

Microscopía de efecto túnel. Ventajas y limitaciones. Análisis de imágenes de sistemas basados en el carbono y nanoestructuras. Ejercicios.

Magnetometría de muestra vibrante (VSM). Conceptos generales. Sensibilidad. Configuración experimental. Microscopía de Fuerza Magnética. Ventajas y limitaciones. Análisis de ejemplos.

Espectroscopía de Impedancia electroquímica: La interfase electroquímica. Procesos electroquímicos. Fundamentos teóricos de la técnica. Formalismo matemático. Aspectos experimentales. Ventajas y desventajas. Los análogos eléctricos y los procesos químicos. Modelos físicos y electroquímicos. Aplicaciones en el estudio de sistemas carbonosos.

**Unidad 7: Introducción al micromagnetismo.**

Fundamentos básicos del micromagnetismo: Teoría de dominio y modelo micromagnético. Energías involucradas. Ecuación de movimiento.

Simulación de procesos micromagnéticos: Estados de equilibrio. Minimización de la energía. Ciclos de histéresis. Procesos de reversión de la magnetización.

Herramientas de simulación micromagnética: uso del software Object Oriented MicroMagnetic

M  
SH



Universidad  
Nacional  
de Córdoba



Facultad de Matemática,  
Astronomía, Física y  
Computación

EXP-UNC 0058325/2019

Anexo de la RCD FAMAF 413/2019, página 23 de 33

Framework (OOMMF). Selección de parámetros. Simulación de nanoestructuras cilíndricas para evaluar propiedades dependientes de la geometría, el tamaño y la composición que determinan el ordenamiento de los momentos magnéticos en nanoestructuras de baja dimensionalidad.

Acceso a Mendieta, CCAD-UNC.

#### **Unidad 8: Funcionalización de sistemas basados en el carbono.**

Fabricación de nanoestructuras de alúmina. Síntesis de nanohilos magnéticos. Generación de defectos por irradiación en superficies de grafito. Generación de películas de óxido de grafeno y óxido de grafeno reducido, por vía seca y vía húmeda, sobre distintos sustratos. Formación de compósitos/híbridos carbonosos con nanoestructuras magnéticas.

#### **PRÁCTICAS**

Se dictarán clases teórico-prácticas, en las cuales se resolverán los problemas propuestos por los docentes. Se realizarán prácticas de laboratorio, en las que se aprenderá sobre medidas de seguridad y el uso de los diferentes equipos del laboratorio disponibles en el del Grupo de Ciencia de Materiales, así como también de otros equipos vinculados al estudio de sistemas basados en el carbono y nanoestructuras magnéticas de la UNC. Se harán mediciones experimentales, las que serán procesadas y analizadas por los alumnos, guiados por los docentes a cargo e invitados. También se realizarán simulaciones micromagnéticas de sistemas propuestos por los docentes, mediante el programa OOMMF instalado en los clusters de Mendieta, CCAD-UNC.

#### **BIBLIOGRAFÍA**

Ashcroft NW and Mermin ND, Solid State Physics, Holt Riehart and Winston, New York, 1976.

Kittel C, Introduction to Solid State Physics, 8th edn, John Wiley and Sons, Inc., New York, 1996.

Ziman J. M., Electrons and phonons. Oxford University Press.

Foa-Torres L, Roche S and Charlier J.C., Introduction to Graphene-based nanomaterials: From electronic structure to quantum transport, Cambridge University Press, New York, 2014.

Messina and Santangelo, Carbon: the future material for advanced technology applications, Springer on line, Vol. 100, 2006.

Manero P.J, Tesis doctoral: Materiales nanoestructurados basados en polianilina, nanotubos de carbon y grafeno, Zaragoza, 2011.

Jorio A., Dresselhaus M. Saito R. and Dresselhaus G., Raman spectroscopy in Graphene-related systems, 1st Edition, John Wiley- VCH, Inc. New York, 2011.

[http://www.veeco.com/pdfs/library/SPM\\_Guide\\_0829\\_05\\_166.pdf](http://www.veeco.com/pdfs/library/SPM_Guide_0829_05_166.pdf).

Allen J. Bard, Larry R. Faulkner. Electrochemical Methods. Fundamentals and Applications. 2da Edición. 2001 John Wiley & Sons, Inc.

E. Barsoukov, J. R. Macdonald. Impedance Spectroscopy. Theory, experiment and applications. 2da. Edición. 2005 John Wiley & Sons, Inc.

Artículos científicos seleccionados por el profesor.

AS  
SH

EXP-UNC 0058325/2019

Anexo de la RCD FAMAF 413/2019, página 24 de 33

**MODALIDAD DE EVALUACIÓN**

Se evaluará el desempeño en los trabajos de laboratorio y se calificarán los informes de los mismos. Cada alumno presentará al finalizar la materia (por escrito y exposición oral) un trabajo de integración, desarrollado de acuerdo al sistema objeto de estudio asignado. Se aprobará con puntaje mayor o igual a siete puntos

**REQUERIMIENTOS PARA EL CURSADO**

Conocimientos de física del estado sólido, química general, magnetismo en materiales.

MS  
SH



Universidad  
Nacional  
de Córdoba



Facultad de Matemática,  
Astronomía, Física y  
Computación

EXP-UNC 0058325/2019

Anexo de la RCD FAMAF 413/2019, página 25 de 33

<b>TÍTULO:</b> Superficies de Riemann			
<b>AÑO:</b> 2020	<b>CUATRIMESTRE:</b> 1°	<b>N° DE CRÉDITOS:</b> 3	<b>VIGENCIA:</b> 3 años
<b>CARGA HORARIA:</b> 56 horas de teoría, 10 horas de práctica			
<b>CARRERA/S:</b> Doctorado en Matemática			

<b>FUNDAMENTOS</b>
El desarrollo de la idea de superficie de Riemann comenzó a mediados del siglo XIX de la mano del matemático Bernhard Riemann, con los intentos de extender el dominio de definición de funciones analíticas definidas sobre un abierto $U$ del plano complejo. La extensión maximal (extensión analítica) se lograba no sobre el propio plano complejo, sino sobre copias de abiertos del mismo que se solapaban, en lo que hoy día conocemos como variedad compleja de dimensión uno.

<b>OBJETIVOS</b>
Presentar un curso de posgrado de funciones de una variable compleja en conexión con topología algebraica, curvas algebraicas, geometría y teoría de números.

<b>PROGRAMA</b>
<p><b>Unidad 1: Superficies de Riemann.</b> Funciones meromorfas. Ceros y polos. Propiedades. Superficies simplemente conexas. Revestimientos y revestimientos ramificados. Uniformización. Toros complejos. Equivalencia. Retículos y bases. Cocientes de <math>C</math> por retículos. Funciones biperiódicas. La función <math>\wp</math> de Weierstrass. Funciones meromorfas en <math>C/\Lambda</math>. La curva elíptica <math>E(\Lambda)</math>. Curvas proyectivas y superficies de Riemann.</p> <p><b>Unidad 2: Superficies de Riemann como espacios anillados.</b> Formas diferenciales meromorfas. Análisis en superficies de Riemann compactas. Divisores. Género. Teorema de Riemann-Roch. Las superficies de Riemann como curvas algebraicas. Teorema de dualidad de Serre. Teorema de Riemann-Hurwitz.</p> <p><b>Unidad 3: El semiplano superior <math>H</math> y sus cocientes.</b> Subgrupos discretos de <math>SL_2(\mathbb{R})</math>. Clasificación de las transformaciones de Möbius. Dominios fundamentales. Subgrupos de congruencia. Estructuras complejas en cocientes. La estructura compleja en <math>\Gamma(1)</math>. El género de la curva <math>X(\Gamma)</math>. Series de Eisenstein. Formas modulares como <math>k</math>-formas diferenciales. Cálculo de la dimensión. Formas modulares para <math>\Gamma(1)</math>. Las funciones <math>\Delta</math> y <math>j</math>.</p> <p><b>Unidad 4: Coeficientes de Fourier de la serie de Eisenstein para <math>\Gamma(1)</math>.</b> Las expansiones de Fourier de <math>\Delta</math> y <math>j</math>. Formas modulares como secciones de un fibrado de líneas. Series de Poincaré. Producto de Petersson. Completitud. Teorema de Picard. Funciones theta.</p>

AS  
SH



Universidad  
Nacional  
de Córdoba



Facultad de Matemática,  
Astronomía, Física y  
Computación

EXP-UNC 0058325/2019

Anexo de la RCD FAMAF 413/2019, página 26 de 33

**Unidad 5: Temas avanzados.**

Operadores de Hecke abstractos para  $\Gamma(1)$ . Interpretación geométrica. El álgebra de Hecke. Serie de Dirichlet asociada a una forma modular. Ecuación funcional y productos de Euler. Adeles, Operadores de Hecke desde el punto de vista adélico.

La ecuación modular para  $\Gamma_0(N)$ . El modelo canónico de  $X_0(N)$  sobre  $\mathbb{Q}$ . La curva  $X_0(N)$  sobre  $\mathbb{Q}$ .

La función zeta de una curva sobre un cuerpo finito y sobre  $\mathbb{Q}$ . La función zeta de  $X_0(N)$ . Enunciado de la conjetura de Taniyama y Weil. El teorema de Fermat.

Multiplicación compleja para curvas elípticas. Extensiones abelianas.

**PRÁCTICAS**

Se darán listas de ejercicios para resolver y entregar.

**BIBLIOGRAFÍA**

Milne J., Modular forms and modular functions.

Forster O., Lectures on Riemann surfaces.

Serre J.P., A course in arithmetic.

**MODALIDAD DE EVALUACIÓN**

Resolución de una lista de problemas y un examen oral sobre los contenidos.

**REQUERIMIENTOS PARA EL CURSADO**

Nociones básicas de variable compleja, topología general y estructuras algebraicas.

MS  
SH



Universidad  
Nacional  
de Córdoba



Facultad de Matemática,  
Astronomía, Física y  
Computación

EXP-UNC 0058325/2019

Anexo de la RCD FAMAF 413/2019, página 27 de 33

<b>TÍTULO:</b> Teoría cuántica de campos en sólidos II: Fenómenos fuera de equilibrio			
<b>AÑO:</b> 2020	<b>CUATRIMESTRE:</b> 1°	<b>N° DE CRÉDITOS:</b> 3	<b>VIGENCIA:</b> 3 años
<b>CARGA HORARIA:</b> 60 horas de teoría, 30 horas de práctica			
<b>CARRERA/S:</b> Doctorado en Física			

**FUNDAMENTOS**

La teoría cuántica de campos de muchos cuerpos se encuentra entre las áreas más fértiles de los últimos cincuenta años: Esta plétora de resultados se disparó con la teoría de la superconductividad (Bardeen-Cooper-Schrieffer) y la de los momentos magnéticos localizados (Anderson-Mott) para extenderse a muchos fenómenos: transiciones de fase del He, aislantes topológicos, efecto hall cuántico, transporte cuántico, efecto Kondo y muchos otros. En este curso se pretende cubrir la brecha entre los cursos de licenciatura en física y estos tópicos. Se dará énfasis variable a los mismos según formación e intereses de los alumnos.

**OBJETIVOS**

Es una extensión del curso de posgrado Teoría Cuántica de Campos en Sólidos 1: Una introducción a problemas de muchos cuerpos. (TCCS 1) donde se introduce el formalismo de las funciones de Green de equilibrio. Aquí se extiende a funciones de Green fuera de equilibrio denominado formalismo Keldysh-Kadanoff-Baym. Esto permite conectar las ideas de la mecánica cuántica y la mecánica estadística con su aplicación a la predicción de magnitudes observables de la física del sólido. En particular fenómenos dinámicos, de transporte y fuera de equilibrio.

**PROGRAMA**

**Unidad 1: Conceptos básicos.**  
Bosones. Fermiones. Excitaciones. Respuesta dieléctrica: El rol de la relación de dispersión. Visión general de los métodos diagramáticos en el problema de muchos cuerpos.

**Unidad 2: Bosones.**  
Fonones acústicos. Condensado de Bose. Fonones en un gas de Bose condensado. Transformación de Bogoliuvov. Superfluidos. Segundo sonido. Dispersión de Raileigh. Apantallamiento y potencial de Yukawa. Segunda cuantificación para el campo electromagnético.

**Unidad 3: Potenciales dependientes del tiempo: teoría de Floquet.**  
Por qué potenciales dependientes del tiempo, ejemplos en nanociencias; complicaciones asociadas a su resolución, posibles enfoques. Teorema de Floquet para Hamiltonianos dependientes del tiempo, espacio de Floquet, cuasienergías y estados de Floquet. Aplicaciones. Estados físicamente equivalentes y zona de Brillouin para las cuasienergías. Ejemplos de aplicación: bombeo cuántico de electrones, induciendo gaps en la estructura del grafeno mediante un láser. Tiempo de tunneling y reloj de Larmor. Tiempo de Büttiker.

**Unidad 4: Polarones y la interacción electrón-fonón.**  
El potencial de deformación. Nube de fonones. Interacción en sistemas moleculares y

Handwritten signature or initials.



Universidad  
Nacional  
de Córdoba



Facultad de Matemática,  
Astronomía, Física y  
Computación

EXP-UNC 0058325/2019

Anexo de la RCD FAMAF 413/2019, página 28 de 33

localizados: Efecto de Frank-Condon. Teoría de transferencia electrónica de Marcus-Hush. La interacción electrón-fonón en metales. Hamiltoniano electrón ión. El SASER, un láser de sonido.

**Unidad 5: Sistemas físicos a temperatura finita.**

Generalización del caso  $T=0$ . La mecánica estadística y el formalismo de ocupación. Propagador de temperatura finita. Fluctuaciones de Vacío a Temperatura finita: par electrón-hueco. Formalismo de Matsubara. Relación entre las funciones de Matsubara y las funciones de Green retardadas. Evaluación de las sumas de Matsubara.

**Unidad 6: Formalismo de Keldysh y ecuaciones generalizadas de Landauer-Büttiker.**

Repaso del transporte decoherente. Idea de Hamiltoniano efectivo. El formalismo de Keldysh para las funciones de temperatura finita. Una aproximación semiclásica para la dependencia temporal. Densidad de estados y ocupaciones. Contactos como condiciones de contorno. Ecuaciones cinéticas. Evaluación de corrientes. Tunelamiento dependiente del tiempo. Efectos de la decoherencia. Ecuaciones de Landauer-Büttiker en el régimen macroscópico. Régimen balístico: sistemas débilmente desordenados. Aproximación de escalera para el propagador partícula agujero. Ecuación de difusión. Régimen localizado. Transporte por saltos de rango variable.

**Unidad 7: Superconductividad.**

Hechos experimentales básicos. Inestabilidad de Cooper. Teoría microscópica de BCS. Temperatura de Transición en un superconductor. Ecuaciones de Bogoliubov-de Gennes. Tunelamiento de electrones. Normal-superconductor, Superconductor-superconductor. Scattering de Andreev. Junturas Josephson. Métodos diagramáticos en superconductividad. Formalismo de Nambu. Fenomenología e ideas teóricas en los superconductores de alta temperatura.

**Unidad 8: Transiciones de fase en sistemas fermiones.**

Rotura de simetría. Teoría cualitativa de las transiciones de fase. Rotura de la serie de perturbaciones y propagadores anómalos. Fase ferromagnética con interacción deltiforme. Divergencia del propagador de dos partículas y amplitud de dispersión en la transición. Teoría de la localización débil. Teoría de escala de la localización. Localización en el espacio de muchos cuerpos. Transiciones de fase en la dinámica cuántica.

**Unidad 9: Diagramas de Feynman en el problema de Kondo.**

Introducción. La segunda aproximación de Born. Aproximación de Parquet. Aproximación de acoplamiento fuerte. Efecto Kondo en puntos cuánticos. Consecuencia en el transporte. Aproximación de bosones esclavos. Otros métodos numéricos. Grupo de renormalización en el espacio real aplicado al problema de Kondo.

**PRÁCTICAS**

Se propondrán problemas de resolución individual que contengan una parte conocida y una porción aún no desarrollada, aproximando a investigaciones originales.

AS  
SH

EXP-UNC 0058325/2019

Anexo de la RCD FAMAF 413/2019, página 29 de 33

**BIBLIOGRAFÍA**

Quantum Field Theory of Many-Body Systems: From the Origin of Sound to an Origin of Light and Electrons, Xiao-Gang Wen, Oxford U. Press, New York, 2004.

Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics : An Introduction, Henrik Bruus, Karsten Flensberg, Oxford University Press, USA, 2004.

Alexander Altland and Ben D. Simons, "Condensed Matter Field Theory", Cambridge University Press; 2 edition, 2010.

Richard Mattuck, A guide to Feynman Diagrams in the Many Body Problem, John Wiley & Sons, 1963.

Gerald D. Mahan, "Many-Particle Physics (Physics of Solids and Liquids)" 3rd Ed., Springer, 2010.

A.A. Abrikosov, L. P. Gorkov, and I.E. Dzyaloshinski, Methods of Quantum Field Theory on Statistical Physics, Dover, 1975.

C. Hewson, The Kondo Problem to Heavy Fermions, Cambridge University Press, 1993.

**MODALIDAD DE EVALUACIÓN**

Evaluación en base a la solución de problemas individuales que se presentarán por escrito y que se defenderán oralmente.

**REQUERIMIENTOS PARA EL CURSADO**

Basta con la formación de Licenciatura en Física o equivalente. Sería deseable, pero no imprescindible, conocimientos de electrónica molecular y/o un curso previo de teoría cuántica de campos.

FF



Universidad  
Nacional  
de Córdoba



Facultad de Matemática,  
Astronomía, Física y  
Computación

EXP-UNC 0058325/2019

Anexo de la RCD FAMAF 413/2019, página 30 de 33

<b>TÍTULO:</b> Teoría del funcional de la densidad y cálculos ab initio			
<b>AÑO:</b> 2020	<b>CUATRIMESTRE:</b> 1°	<b>N° DE CRÉDITOS:</b> 3	<b>VIGENCIA:</b> 3 años
<b>CARGA HORARIA:</b> 60 horas de teoría, 70 horas de práctica			
<b>CARRERA/S:</b> Doctorado en Física			

### FUNDAMENTOS

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 multielectrónica. Si bien esta resolución de la ecuación de Schrödinger permite describir de forma exacta el comportamiento de los sistemas muy pequeños, su capacidad de predicción se ve limitada por el hecho de que sus ecuaciones son demasiado complejas de resolver numéricamente o menos aún analíticamente.

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 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.

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

Handwritten signature/initials.



Universidad  
Nacional  
de Córdoba



Facultad de Matemática,  
Astronomía, Física y  
Computación

EXP-UNC 0058325/2019

Anexo de la RCD FAMAF 413/2019, página 31 de 33

obtener una solución aproximada a una ecuación diferencial. 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.

### OBJETIVOS

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 más 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 es posible gracias a dos teoremas de Hohenberg-Kohn permite 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 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 puede tratar sistemas bidimensionales, como nanomateriales. Es también posible tratar sistemas sin simetría como moléculas o macro moléculas.

Posteriormente se expondrá la extensión de la DFT al dominio temporal (teoría del funcional de la densidad dependiente del tiempo), el cual nos permitirá realizar cálculos de excitaciones electrónicas.

Como parte del curso se harán trabajos prácticos sobre sistemas tales como bulk, superficiales, nanoestructurados y bidimensionales.

Al finalizar el curso el estudiante estará en condiciones de realizar cálculos ab initio para distintos sistemas físicos, con una variedad de programas de cálculo.

Handwritten initials or signature.

**PROGRAMA**

**Unidad 1: Cálculo de estructura electrónica.**

Hamiltoniano cuántico para la resolución del problema de muchos cuerpos. Aproximación de Born-Oppenheimer. 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.

**Unidad 2: 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.

**Unidad 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.

**Unidad 4: 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.

**Unidad 5: 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 archivos de entrada, ejemplos. Cálculos de sistemas sin periodicidad. NEB.

**Unidad 6: Otros programas de cálculo.**

Presentación de los software ASE y ORCA. Cálculo autoconsistente. Análisis de inputs, estructura cristalina y variables del cálculo. Cálculos de densidad de estados, estructura de bandas, densidad electrónica de carga.

**PRÁCTICAS**

Desarrollo y aplicación de programas de cálculos, en el aula supervisado por el docente. Culminación de los mismos a realizar por el alumno como tarea.

**BIBLIOGRAFÍA**

1. 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

*Handwritten initials/signature*



UNC

Universidad  
Nacional  
de Córdoba



Facultad de Matemática,  
Astronomía, Física y  
Computación

EXP-UNC 0058325/2019

Anexo de la RCD FAMAF 413/2019, página 33 de 33

on Chemistry, ISBN-10: 0195092767. ISBN-13: 978-0195092769,  
2. A Primer in Density Functional Theory, Editors: Fiolhais, Carlos, Nogueira, Fernando, Marques, Miguel A.L., ISBN 978-3-540-37072-71.  
3. Density Functional Theory: A Practical Introduction, Author(s): David S. Sholl Janice A. Steckel, Copyright © 2009 John Wiley & Sons, Inc.  
4. User's Guide, WIEN2k 19.1 (Release 06/13/2019), Peter Blaha, Karlheinz Schwarz, Georg K. H. Madsen, Dieter Kvasnicka, Joachim Luitz, Robert Laskowski, Fabien Tran, Laurence D. Marks, Vienna University of Technology. Institute of Materials Chemistry. Getreidemarkt 9/165-TC A-1060 Vienna, Austria. [http://www.wien2k.at/reg\\_user/textbooks/usersguide.pdf](http://www.wien2k.at/reg_user/textbooks/usersguide.pdf)  
5. Developer's Manual for Quantum ESPRESSO (v.6.4.1).  
[www.quantum-espresso.org/resources/developers-manual](http://www.quantum-espresso.org/resources/developers-manual).  
6. Atomic Simulation Environment (ASE). The Atomic Simulation Environment — A Python library for working with atoms.  
[www.semanticscholar.org/paper/The-atomic-simulation-environment-a-Python-library-Larsen-Mortensen/](http://www.semanticscholar.org/paper/The-atomic-simulation-environment-a-Python-library-Larsen-Mortensen/)  
7. ORCA Manual.  
[https://cec.mpg.de/fileadmin/media/Forschung/ORCA/orca\\_manual\\_4\\_0\\_1.pdf](https://cec.mpg.de/fileadmin/media/Forschung/ORCA/orca_manual_4_0_1.pdf)

#### MODALIDAD DE EVALUACIÓN

Evaluación continua mediante realización y presentación de trabajos prácticos. Para regularizar se necesita aprobar tres trabajos prácticos. Para aprobar el curso, debe presentar tres trabajos prácticos aprobados y aprobar un trabajo final.

#### REQUERIMIENTOS PARA EL CURSADO

Conocimientos de mecánica cuántica, conceptos básicos de cristalografía y de programación.

Handwritten initials: "M" and "FP"