

TÍTULO: Análisis de Fourier en Grupos			
AÑO: 2024	CUATRIMESTRE: 2°	N° DE CRÉDITOS: 3	VIGENCIA: 3 años
CARGA HORARIA: 60 horas de teoría y 40 horas de práctica			
CARRERA/S: Doctorado en Matemática			

FUNDAMENTOS

La transformada de Fourier es una herramienta fundamental en el análisis, con aplicaciones teóricas y una importancia crucial en diversas áreas de la ingeniería. Nos permite descomponer una función en términos de funciones más simples. En este curso, exploraremos cómo generalizar esta transformada desde el contexto euclidiano al de grupos localmente compactos. Los conceptos estudiados se profundizarán, centrándonos especialmente en el grupo de Heisenberg que es el ejemplo más conocido del ámbito de los grupos de Lie nilpotentes y desempeña un papel importante en varias ramas de las matemáticas.

OBJETIVOS

El objetivo principal del curso es estudiar los conocimientos básicos de la teoría de Fourier en grupos y de pares de Gelfand. El alumno obtendrá un conocimiento elemental sobre pares de Gelfand y transformada de Fourier esférica, lo que abarcará medida en grupos topológicos, concepto básicos de representaciones y funciones esféricas. Se va a 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.

PROGRAMA

Unidad I: Introducción

Nociones básicas sobre C^* álgebras. Transformada de Gelfand. Teorema espectral general. Transformada y series de Fourier.

Unidad II: Grupos Topológicos

Grupos topológicos. Medida de Haar. La función modular. Transformada de Fourier en grupos abelianos.

Unidad III: Teoría de representaciones

Representaciones unitarias e irreducibles de grupos topológicos. Lema de Shur. Representaciones de L^1 . Funciones de tipo positivo. Relación entre representaciones irreducibles y funciones de tipo positivo. La transformada de Fourier en grupos.

Unidad IV: El grupo de Heisenberg

Definición del grupo de Heisenberg. Representaciones unitarias e irreducibles. Transformada de Fourier. Teorema de Plancherel. Fórmula de inversión.

Unidad V: Pares de Gelfand

Definición de pares de Gelfand. Funciones esféricas. Funciones esféricas de tipo positivo. Transformada de Fourier esférica. Medida de Plancherel.

Unidad VI: El par de Gelfand $(U(n), H_n)$

El par de Gelfand dado por el grupo de Heisenberg H_n y el grupo unitario $U(n)$. Teorema de Helgason. Funciones esféricas del par de $(U(n), H_n)$. Su transformada de Fourier esférica.

Fórmula de Plancherel-Godement. Fórmula de inversión.

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.

BIBLIOGRAFÍA

"Análisis Armónica No Conmutativa", F. Ricci, notas de curso expuestas en la red.
"Harmonic Analysis on the Heisenberg group." S. Thangavelu. Progress in mathematics. Vol 159, Birkhauser, 1998.
"Appunti per il corso di Analisi Armonica", F. Ricci, notas de curso expuestas en la red.
"Analyse Harmonique." J. Faraut. Les cours de C.I.M.P.A.
"Deus Cours D'Analyse Harmonique." J. Faraut y K. Harzallah. Progress in mathematics. Vol 69, Birkhauser, 1987.

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.

TÍTULO: Cálculos Computacionales en Sistemas de Interés en la Física de Superficies			
AÑO: 2024	CUATRIMESTRE: 2°	N° DE CRÉDITOS: 1	VIGENCIA: 3 años
CARGA HORARIA: 23 horas de teoría y 12 horas de práctica			
CARRERA/S: Doctorado en Física			

FUNDAMENTOS

La física de superficies desempeña un papel cada vez más importante en una amplia gama de disciplinas científicas y tecnológicas, tanto en aspectos fundamentales como aplicaciones prácticas. En primer lugar, las propiedades superficiales de los materiales son determinantes en procesos tan diversos como la adsorción, la catálisis, la corrosión y la formación de películas delgadas, todos los cuales son fundamentales en la industria y la tecnología. Además, la comprensión de la física de superficies es esencial para el diseño y la optimización de dispositivos electrónicos y sensores, así como para el desarrollo de materiales avanzados con propiedades específicas. En el ámbito de la nanotecnología, la física de superficies cobra aún más importancia, ya que las propiedades de los materiales a nanoescala están dominadas por su superficie. El avance experimental en el diseño y caracterización en la nanoescala permite explorar en detalle sus propiedades, mientras que los cálculos computacionales permiten interpretarlas e incluso predecirlas.

Los cálculos computacionales de física de superficies son una herramienta sumamente valiosa para investigar las propiedades electrónicas y estructurales de superficies sólidas a nivel atómico y molecular. Además, el dominio de técnicas de cálculo como DFT y DFTB capacita a los estudiantes para realizar simulaciones realistas y precisas, lo que complementa y enriquece su comprensión teórica y experimental. Esta formación les proporciona una base sólida para abordar problemas actuales en áreas como la nanotecnología, la ciencia de materiales y la física de la superficie, y los prepara para contribuir significativamente al avance de la investigación en estos campos.

OBJETIVOS

El curso tiene como objetivo proporcionar a los estudiantes una comprensión profunda y práctica de los métodos computacionales utilizados para investigar sistemas de superficie en física de materiales. A través de una combinación de teoría y práctica, los estudiantes aprenderán a aplicar la dinámica molecular basada en cálculos de primeros principios, desde la formulación del Hamiltoniano hasta aproximaciones avanzadas como la Dinámica de Ehrenfest. Además, se explorarán métodos generales de cálculo de estructura electrónica y energías totales, como el método Hartree-Fock, la Teoría de la Funcional de Densidad (DFT) y el método de "Tight-Binding". El curso también abordará aspectos fundamentales de la estructura y energética de superficies limpias, la adsorción atómica y la dinámica gas-superficie, brindando a los estudiantes las herramientas necesarias para investigar fenómenos clave como la reactividad en interfaces sólido-gas. Con este curso, los estudiantes estarán preparados para abordar desafíos actuales en áreas como la nanotecnología, la catálisis y la ciencia de materiales desde una perspectiva computacional avanzada.

PROGRAMA

Unidad I: Dinámica Molecular a partir de cálculos de primeros principios (ab initio)

- 1.1. Hamiltoniano típico de un material con superficie limpia y/o en presencia de adsorbatos.
- 1.2. Aproximación de Born-Oppenheimer (ABO).
- 1.3. Aproximaciones más allá de la ABO: Dinámica de Ehrenfest.

Unidad II: Métodos generales de cálculo de estructura electrónica y energías totales

2.1 El método Hartree-Fock. 2.2 Teoría de la Funcional Densidad (DFT) y sus implementaciones. 2.3. Método de "Tight-Binding"

Unidad III: Estructura y energética de superficies limpias

3.1. Cristalografía de superficies: redes bidimensionales, cristales semi infinitos, relajación y reconstrucción, notación de estructuras de superficies, superficies "vicinal", red recíproca. 3.2. Estructura electrónica de superficies. 3.3. Superficies de materiales de diferentes características: metálicas, de semiconductores e iónicos. 3.4 Vibraciones de superficies

Unidad IV: Adsorción atómica

4.1 Teoría del medio efectivo y el método del átomo embebido. 4.2 Conceptos sobre reactividad: el modelo de la banda d. 4.3 Ejemplos de adsorción sobre superficies planas y limpias, efectos de recubrimiento y de rugosidad de la superficie. 4.4 Comparación de la estabilidad de estructuras de diferente recubrimiento y su dependencia con la presión y la temperatura. 4.5 Reacciones sobre superficies: caminos de reacción y estado de transición (definición, propiedades y métodos de búsqueda).

Unidad V: Dinámica Gas-Superficie

5.1 Parametrización de superficies de energía potencial. 5.2 Dinámica cuántica vs. Dinámica Clásica. 5.3. Modelización de procesos de dispersión molécula-superficie: condiciones iniciales. 5.4 Dispersión, adsorción molecular y disociativa. 5.5 Difusión de adsorbatos. Métodos dinámicos vs. Cinéticos

PRÁCTICAS

Las actividades propuestas se desarrollarán con dos objetivos principales: analizar ejemplos donde se vean expuestos los conceptos presentados en las clases teóricas para su discusión y dar al estudiante herramientas para poder realizar cálculos iniciales de forma independiente. Las clases se desarrollarán en las salas de computación de FaMAF utilizando programas libres y de código abierto. Se podrán utilizar las computadoras propias de la sala o notebooks que lleven los estudiantes. Durante las clases los docentes realizarán presentaciones de las actividades propuestas con directrices para su ejecución y luego supervisarán la realización de las mismas contestando dudas y consultas. Al finalizar cada temática los estudiantes presentarán una de las actividades seleccionada por los docentes.

BIBLIOGRAFÍA

- 1- David S. Sholl, Janice A. Steckel - Density Functional Theory: A Practical Introduction. Wiley Editorial (2009).
- 2- Richard M. Martin - Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods. Cambridge University Press (2020).
- 3- Jorge Kohanoff - Electronic Structure Calculations for Solids and Molecules: Theory and Computational Methods. Cambridge University Press (2006).
- 4- Feliciano Giustino - Materials Modelling using Density Functional Theory. Oxford University Press (2014).
- 5- Charles Kittel - Introduction to Solid State Physics. Wiley (2008).
- 6- Jutta Rogal, Karsten Reuter - Ab Initio Atomistic Thermodynamics for Surfaces: A Primer. Defense Technical Information Center (2006).

--

MODALIDAD DE EVALUACIÓN

Los criterios de evaluación serán:

- a) La calidad de los conocimientos teóricos y prácticos adquiridos por el estudiante.
- b) La integración de conocimientos.
- c) El desarrollo de capacidades, habilidades y destrezas para el cálculo y análisis.
- d) Asistencia a clases y participación activa.

La regularidad se obtendrá con el 80% de la asistencia y la realización de las actividades prácticas. El examen final consiste de una evaluación escrita individual que integra conceptos teóricos y actividades prácticas de simulación.

REQUERIMIENTOS PARA EL CURSADO

Conocimiento de mecánica cuántica e introductorio de física del estado sólido.

TÍTULO: Fundamentos de Física Médica			
AÑO: 2024	CUATRIMESTRE: 2°	N° DE CRÉDITOS: 3	VIGENCIA: 3 años
CARGA HORARIA: 60 horas de teoría y 60 horas de práctica			
CARRERA/S: Doctorado en Física			

FUNDAMENTOS

La física médica es una de las áreas de investigación y desarrollo dentro de la física, teniendo sus orígenes en la aplicación de radiaciones ionizantes en el ámbito de salud. pero no limitándose a ésta; ya que congrega todo tipo de aplicaciones de la física a la medicina y afines, como odontología, veterinaria, biología, etc.

Las técnicas, metodologías y tecnologías empleadas actualmente en física médica requieren del estudio formativo específico por parte de quienes se introducen en este campo de investigación.

En particular, la descripción y aplicación de procesos de interacción de la radiación con la materia cuando ésta involucra tejidos biológicos, junto a la descripción de los efectos biológicos derivados de la irradiación; junto a la comprensión de los procedimientos no invasivos de imagenología y al uso de radiofármacos para caracterizar propiedades metabólicas/fisiológicas son algunas de las líneas más importantes de la física médica.

Este curso proporciona a los alumnos un abordaje genérico de las diferentes líneas internas de la física médica, otorgando conocimientos básicos así como adiestrando destrezas necesarias para desenvolverse en las diferentes áreas de la física médica, desde capacidades experimentales, diseño y manejo de instrumentación propia del área, así como elementos básicos de modelado computacional de procesos que involucran radiaciones ionizantes en aplicaciones médicas.

En este contexto, y a partir de la creación del grupo de trabajo en física médica de FAMAFA en 2008, donde se forma regularmente a doctores, postdocs e investigadores, nacionales y extranjeros, surge la necesidad de ofrecer cursos formativos formales orientados a la formación de recursos humanos con capacidad para desenvolverse en las diferentes áreas de la física médica, aprovechando la expertise de los investigadores del grupo.

OBJETIVOS

- Adquirir conocimientos teórico-prácticos en el área de física médica.
- Instruir al alumno en el uso de radiaciones para terapia.
- Instruir al alumno en el uso de radiaciones para diagnóstico por imágenes.
- Introducir al alumno al manejo de metodologías de dosimetría de radiaciones.
- Introducir al alumno al manejo de técnicas de cómputo de transporte de radiación.

PROGRAMA

Unidad I: Medida de la radiación

Magnitudes y unidades. Definiciones básicas: Kerma, dosis absorbida, Exposición. Teoría de la Cavidad de Bragg-Gray. Equilibrio electrónico. Descripción física y precisión de los sistemas de medición y cálculo: derivación de incertezas.

Unidad II: Dosímetros

Cámaras de Ionización: Farmer y plano-paralela. Detectores de estado sólido: detectores termoluminiscentes (TLD), semiconductores y centelladores plásticos. Filmes dosimétricos. dosímetros químicos: solución de Fricke y polímeros.

Unidad III: Generadores de radiación

Equipos tradicionales: Kilovoltaje y Megavoltaje. Terapia superficial y profunda. Unidad de ^{60}Co . Acelerador lineal convencional: fotones y electrones. Aceleradores de partículas cargadas masivas: iones pesados y terapia con protones. Hadroterapia. Columnas térmicas y epitérmicas en reactores nucleares. Terapia con neutrones: BNCT.

Unidad IV: Dosimetría convencional y técnicas de irradiación

Determinaciones dosimétricas en fantoma. Calidad de radiación y distribución de dosis. Cálculo dosimétrico elemental: método standard en terapia externa tradicional. Protocolos dosimétricos. Técnicas de irradiación en terapia convencional: múltiples campos, terapia de arco, IMRT. Braquiterapia. Planificación de tratamientos y sistemas de planificación de uso clínico (TPS). Introducción a algoritmos de "convolution kernel".

Unidad V: Dosimetría avanzada

Haces mixtos. Descomposición dosimétrica y caracterización: componente terapéutica. Método Milano: dosimetría con diferente composición isotópica del gel de Fricke. Método Mainz: dosimetría con TLD y máscaras de cadmio.

Unidad VI: Nociones básicas en medicina nuclear y dosimetría interna

Radionucleidos: producción y caracterización. Actividad. Dosis equivalente, dosis efectiva, transferencia lineal de energía (LET) y daño biológico. Efectividad biológica relativa (RBE) y modelo MIRD. Cálculo de factores S. Radionucleidos para Imaging metabólico.

Unidad VII: Imaging médico: nociones básicas

Necesidad de adquirir información del paciente: estructuras anatómicas y datos metabólicos. Imágenes para radioterapia. Radiografía convencional por contraste de absorción. Tomografía computada: algoritmos de reconstrucción 3D. Técnicas de imaging funcional: cámara Gamma, Single Photon Emission Computed Tomography (SPECT) y Positron Emission Tomography (PET).

Unidad VIII: Simulaciones Monte Carlo

Procesos estocásticos. Variables aleatorias. Principios de simulación Monte Carlo: códigos FLUKA y PENELOPE.

Unidad IX: Trabajos prácticos especiales ACTIVIDAD COMPLEMENTARIA

Práctico de laboratorio I: Experimentación virtual con técnicas de simulación Monte Carlo vinculadas a: Mediciones de flujo y espectro de radiación ionizante. Distribución de dosis. Mediciones con cámara de ionización de PDD (percentage depth dose) en fantoma de agua para haces de RX. Complementación con simulaciones Monte Carlo.

Práctico de laboratorio II: Experimentación virtual con técnicas de simulación Monte Carlo vinculadas a: Curvas de isodosis en haz de electrones. Mediciones con film dosimétrico de curvas de isodosis en profundidad. Complementación con simulaciones Monte Carlo.

Práctico de laboratorio III: Experimentación virtual con técnicas de simulación Monte Carlo

vinculadas a: Distribución de dosis para campo conformado. Elaboración de dosímetro a gel de Fricke. Análisis óptico del detector. Determinación de distribuciones de dosis en campo conformado. Complementación con simulaciones Monte Carlo.

Práctico de laboratorio V: Experimentación virtual con técnicas de simulación Monte Carlo vinculadas a: Distribución 3D de dosis en medicina nuclear. Adaptación y aplicación de rutinas Monte Carlo. Cálculo dosimétrico. Comparación con datos experimentales.

Práctico de laboratorio VI: Experimentación virtual con técnicas de simulación Monte Carlo vinculadas a: Imágenes radiográficas y tomográficas. Análisis, reconstrucción volumétrica y procesamiento de imágenes radiológicas.

PRÁCTICAS

Práctico de laboratorio I: Experimentación virtual con técnicas de simulación Monte Carlo vinculadas a: Mediciones de flujo y espectro de radiación ionizante. Distribución de dosis. Mediciones con cámara de ionización de PDD (percentage depth dose) en fantoma de agua para haces de RX. Complementación con simulaciones Monte Carlo.

Práctico de laboratorio II: Experimentación virtual con técnicas de simulación Monte Carlo vinculadas a: Curvas de isodosis en haz de electrones. Mediciones con film dosimétrico de curvas de isodosis en profundidad. Complementación con simulaciones Monte Carlo.

Práctico de laboratorio III: Experimentación virtual con técnicas de simulación Monte Carlo vinculadas a: Distribución de dosis para campo conformado. Elaboración de dosímetro a gel de Fricke. Análisis óptico del detector. Determinación de distribuciones de dosis en campo conformado. Complementación con simulaciones Monte Carlo.

Práctico de laboratorio V: Experimentación virtual con técnicas de simulación Monte Carlo vinculadas a: Distribución 3D de dosis en medicina nuclear. Adaptación y aplicación de rutinas Monte Carlo. Cálculo dosimétrico. Comparación con datos experimentales.

Práctico de laboratorio VI: Experimentación virtual con técnicas de simulación Monte Carlo vinculadas a: Imágenes radiográficas y tomográficas. Análisis, reconstrucción volumétrica y procesamiento de imágenes radiológicas.

BIBLIOGRAFÍA

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

- F. Kahn. The physics of the radiation therapy 3ra. Ed., Editorial Lippincott Williams & Wil, 2003.
- S. Cherry, J. Sorrenson and M. Phelps. Physics in nuclear medicine. Editorial Saunders, Philadelphia Third Edition 2003.
- F. Salvat, J. Fernández-Varea and J. Sempau. PENELOPE, an algorithm and computing code for Monte Carlo simulation of electronphoton showers. Editorial NEA, France 2003.
- F. Attix. Introduction to radiological physics and radiation dosimetry. Editorial John Wiley and

Sons, 1986.

- M. Valente Física nuclear con aplicaciones Notas del curso de especialidad en FaMAF 2008. (disponible en: <http://www.famaf.unc.edu.ar/~valente>)

- M. Valente Elementos de cálculo dosimétrico para hadronterapia y campos mixtos Notas del curso de posgrado en FaMAF 2010-2011-2012. (disponible en: <http://www.famaf.unc.edu.ar/~valente>)

- M. Valente y P. Perez Dosimetría y radiobiología. Notas para curso de grado, Universidad de Catamarca., 2011. (disponible en: <http://www.famaf.unc.edu.ar/~valente>)

- M. Valente. Física de la Radioterapia. Notas para curso de posgrado universidad de la Frontera, Chile 2009-2010-2011-2012. (disponible en: <http://www.famaf.unc.edu.ar/~valente>)

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

- M. Mariani, E. Vanossi, G. Gambarini, M. Carrara, M.Valente. Preliminary results from polymer gel dosimeter for absorbed dose imaging in radiotherapy. RADIA-TION PHYSICS AND CHEMISTRY Vol. 76 Issue: 8 Number: 9 Pages: from 1507 to 1510 Year: 2007.

- G. Gambarini, D. Brusa, M. Carrara , G. Castellano, M. Mariani, S. Tomatis, M. Valente E. Vanossi. Dose Imaging in radiotherapy photon fields with Fricke and Normoxic-polymer Gels. JOURNAL OF PHYSICS: CONFERENCE SERIES Volume: 41 Issue: 1 Number: 1 Pages: from 466 to 474 Year: 2006.

- G. Castellano D. Brusa, M. Carrara, G. Gambarini, M.Valente. An optimized Mon-te Carlo (PENLOPE) code for the characterization of gel-layer detectors in radiotherapy. NUCLEAR INSTRUMENTS AND METHODS IN PHYSICS RESEARCH A - ACCELERATORS, SPECTROMETERS, DETECTORS AND ASSO-CIATED EQUIPAMENT Volume: 580 Pages: from 502 to 505 Year: 2007.

- R. Bevilacqua, G. Giannini, F. Calligaris, D. Fonatanarosa, F. Longo, G. Scian, P. Torato, K. Vittor, E. Vallazza, M. Severgnini, R. Vidimari, G. Bartesaghi, V. Conti, V. Mascagna, C. Perboni, M. Prest, G. Gambarini, S. Gay, M. Valente, et. al. PhoNesS: A novel approach to BNCT with conventional radiotherapy accelerators. NUCLEAR INSTRUMENTS AND METHODS IN PHYSICS RESEARCH A - ACCELERATORS, SPECTROMETERS, DETECTORS AND ASSOCIATED EQ-UIPAMENT Volume: 572 Issue: 1 Number: 1 Pages: from 231 a 232 Year: 2007.

- G. Gambarini, R.Moss, M. Mariani, M. Carrara, G. Daquino, V. Nievaart, M. Valente. Gel dosimeters as useful dose and thermal-fluence detectors in boron neutron capture (BNCT). JOURNAL OF RADIATION EFFECTS AND DEFECTS IN SOLIDS (ISSN 1042-0150 print/ISSN 1029-4953 on-line) Volume:162 Number: 10-11 Year: 2007.

- M. Valente, E. Aon, M. Brunetto, G. Castellano, F. Gallivanone, G. Gambarini. Gel dosimetry measurements and Monte Carlo modeling for external radiotherapy photon beams. Comparison with a treatment planning system dose distribution. NUCLEAR INSTRUMENTS AND METHODS IN PHYSICS RESEARCH A - AC-CELERATORS, SPECTROMETERS, DETECTORS AND ASSOCIATED EQUI-PAMENT Volume: 580 Pages: from 497 to 501 Year: 2007.

- S. Tomatis, M. Carrara, G. Gambarini, R. Marchesini and M. Valente. Gel-layer dosimetry for dose verification in intensity modulated radiation therapy. NUCLE-AR INSTRUMENTS AND METHODS IN PHYSICS RESEARCH A - ACCELE-RATORS, SPECTROMETERS, DETECTORS AND ASSOCIATED EQUIPAMENT Volume: 580 Pages: from 506 to 509 Year: 2007.

- G. Gambarini S. Agosteo S Altieri S. Bortolussi M. Carrara S. Gay C. Petrovich G. Rosi M. Valente. Dose distributions in phantoms irradiated in thermal columns of different nuclear

reactors. RADIATION PROTECTION DOSIMETRY Volume: 123 Number: 4 Year: 2007.

MODALIDAD DE EVALUACIÓN

FORMAS DE EVALUACIÓN

- Dos (2) evaluaciones parciales sobre contenidos teórico-prácticos.
- El examen final contará de una evaluación escrita sobre contenidos teórico-prácticos y de laboratorio.
- No existe régimen de promoción

CONDICIONES PARA OBTENER LA REGULARIDAD

ASISTENCIA

- Cobertura de un mínimo de 60% de la totalidad de las horas previstas, tanto teóricas, prácticas y de laboratorio.

EXÁMENES PARCIALES

- Aprobación de 2 exámenes parciales o sus correspondientes recuperatorios con calificación mayor o igual al 60%

REQUERIMIENTOS PARA EL CURSADO

Conocimientos básicos de mecánica cuántica

TÍTULO: Haces perversos y aplicaciones a la teoría de representaciones			
AÑO: 2024	CUATRIMESTRE: 2°	N° DE CRÉDITOS: 3	VIGENCIA: 3 años
CARGA HORARIA: 60 horas de teoría y 30 horas de práctica			
CARRERA/S: Doctorado en Matemática, Doctorado en Física			

FUNDAMENTOS

Los haces perversos fueron introducidos por Beilinson, Bernstein, Deligne y Gabber en una monografía de la serie Asterisque en 1981, con el objetivo de formalizar las demostraciones de las conjeturas de Kazhdan-Lusztig ofrecidas por Beilinson-Bernstein y Brylinski-Kashiwara. En el desarrollo de esta noción confluyen dos teorías fundamentales de la década de los 70: la teoría de homología de intersección de Goresky-MacPherson y la correspondencia de Riemann-Hilbert debida a Kashiwara y Mebkhout. La teoría de haces perversos ha sido aplicada exitosamente en una amplia variedad de problemas en teoría de representaciones, en parte porque es una técnica que en última instancia se reduce a la verificación de un número finito de condiciones.

OBJETIVOS

El objetivo del curso es introducir a la teoría de haces perversos para permitir la comprensión de la teoría moderna de representaciones y el uso de las técnicas asociadas a esta noción.

PROGRAMA

Unidad I: Teoría de haces

1. Haces
2. Pullback, push-forward y cambio de base
3. Incrustaciones abiertas y cerradas
4. Producto tensorial y el haz Hom
5. El adjunto a derecha de un push-forward propio
6. Relaciones entre transformaciones naturales
7. Sistemas locales
8. Homotopía
9. Más teoremas de cambio de base

Unidad II: Categorías Derivadas

1. Categorías y funtores. Categorías monoidales.
2. Categorías aditivas y abelianas. Categorías trianguladas.
3. Complejos de cadenas y la categoría derivada.
4. Funtores derivados y t-estructuras.
5. Categorías de Karoubi y de Krull-Schmidt.
6. Grupos de Grothendieck
7. Dualidad para anillos de dimensión global finita

Unidad III: Haces Constructibles en variedades algebraicas complejas

1. Preliminares de geometría algebraica compleja
2. Pullback y cambio de base suaves
3. Estratificaciones y haces constructibles
4. Divisores con cruces normales simples
5. Cambios de base y la línea afín
6. Teorema de anulción de Artin

7. Functores de haces y constructibilidad
8. Dualidad de Verdier

Unidad IV: Haces perversos

1. La t -estructura perversa.
2. Producto tensorial y haz Hom para haces perversos.
3. Complejos de cohomología de intersección.
4. La propiedad noetheriana de los haces perversos.
5. Subconjuntos abiertos afines y morfismos afines.
6. Pullback suave.
7. Descenso suave
8. Mapas semipequeños.
9. El teorema de la descomposición y el teorema difícil de Lefschetz.

PRÁCTICAS

Resolución de ejercicios.

BIBLIOGRAFÍA

P. N. Achar, Perverse sheaves and applications to representation theory. Providence, RI: American Mathematical Society (AMS) (2021; Zbl 1524.14001)

MODALIDAD DE EVALUACIÓN

Examen final sobre temas del curso.

REQUERIMIENTOS PARA EL CURSADO

Conocimientos básicos de estructuras algebraicas y álgebra homológica.

TÍTULO: Imágenes por resonancia magnética nuclear basadas en contrastes relaxométricos.			
AÑO: 2024	CUATRIMESTRE: 2°	N° DE CRÉDITOS: 2	VIGENCIA: 3 años
CARGA HORARIA: 40 horas de teoría y 10 horas de práctica			
CARRERA/S: Doctorado en Física			

FUNDAMENTOS

Las imágenes por RMN representan un hito en la evolución de las técnicas experimentales de RMN, no sólo por el doble premio Nobel otorgado a P. Mansfield y P. Lauterbur en 2003, sino por el tremendo impacto que tuvo esta técnica en el campo biomédico en los últimos años. De hecho, el mencionado premio Nobel fue otorgado en medicina. No obstante, en la obtención de estas imágenes se encuentra una gran variedad y riqueza de conceptos físicos, especialmente cuando dicha imagen viene pesada por algún tipo de contraste de origen físico (relajación, difusión, etc.). Lejos de ser una técnica estandarizada, los avances que se producen tanto en el campo académico como en el tecnológico hacen pensar que esta técnica no sólo continuará revolucionando el diagnóstico biomédico, sino que su acceso masivo es casi inminente, a la par de sorprender con aplicaciones que nos llevan a las fronteras del conocimiento, como por ejemplo, a través de las imágenes funcionales y del alto campo, principalmente en las neurociencias. Uno de los fenómenos físicos más importante para la generación de contraste en una imagen por RMN es la relajación magnética nuclear. En los últimos años, se ha encontrado que no sólo la relajación en sí es relevante en este contexto, sino que además lo es la dispersión de ésta con la frecuencia de Larmor. La tecnología de RMN ha incursionado en enfoques alternativos para la generación de imágenes, involucrando experimentos específicos que optimizan la explotación de los fenómenos relaxométricos en pro de lograr mejores imágenes, o misma calidad en tiempos inferiores. Estos enfoques atañen tanto al hardware utilizado, a la metodología experimental implementada con dicho hardware, como a nuevas formulaciones de medios de contraste basados en nanotecnología.

OBJETIVOS

El principal objetivo es que el alumno se inicie en el tema y comprenda el proceso de formación de una imagen por RMN, y comprenda cómo las características relaxométricas de la muestra determinan el contraste. El curso se orienta principalmente a técnicas de imágenes implementadas en campos magnéticos de baja intensidad (menores a 0.5T). El programa inicia con el estudio general de la relaxometría magnética nuclear, luego el análisis de cómo funcionan las técnicas de imágenes, para finalmente enfocarse en imágenes logradas con contrastes relaxométricos.

PROGRAMA

Unidad I: Conceptos preliminares de relaxometría magnética nuclear

Definiciones. Relajación longitudinal y transversal. Otros parámetros de relajación. Relaxometría en el sistema rotante. SLOAFI. Spin-lock pulsado.

Unidad II: Relaxometría en el sistema laboratorio

El experimento de campo ciclado para relaxometría T1. Interpretación de las curvas de dispersión. Comportamiento relaxométrico típico de los principales agentes de contraste.

Unidad III: Principios básicos para implementar una imagen por RMN

Señal y densidad de espines. La magnetización nuclear en presencia de gradientes de campo. Codificación espacial en frecuencia. Excitación selectiva y no-selectiva.

Unidad IV: Técnica de Imágenes basadas en Transformada de Fourier

Señal adquirida en presencia de un gradiente de campo magnético: Imagen 1D. Codificación en fase y frecuencia. Espacio-k. Imágenes 2D. Método de imágenes por eco de gradiente. Trayectoria en el espacio-k. Imagen por eco de espín.

Unidad V: Relación señal-ruido y contraste

Señal y ruido. Relación señal-ruido. Consecuencias del ruido en la señal en la imagen. Contraste. Relación contraste-ruido. Visibilidad. Principales contrastes.

Unidad VI: Contrastes por relajación

Imágenes pesadas por T1 y T2. Imágenes pesadas por relajación en el sistema rotante.

Unidad VII: Imágenes basadas en técnicas de campo magnético ciclado

Prepolarización en imágenes a campos bajos. Técnicas de campo magnético ciclado: NP y PP. Contraste por dispersión de T1.

PRÁCTICAS

Experimentos básicos de relajación. Medición de dispersiones de relajación T1 en muestras típicas. Análisis de papers con informes y un trabajo práctico en el laboratorio para comprender paso a paso la formación de una imagen. Trabajos supervisados y aprobados con informes. Se llevan a cabo en FaMAF. Se realizan bajo supervisión y se aprueban mediante informe escrito.

BIBLIOGRAFÍA

R. Kimmich, NMR Tomography, Diffusometry, Relaxometry, Springer-Verlag, Berlin (1997).
B. C. Gerstein y C. R. Dybowski, Transient Techniques in NMR of Solids, Academic Press, Orlando (1985).
E. Anoardo, C. Hauser y R. Kimmich, Low-frequency molecular dynamics studied by spin-lock field-cycling imaging, J. Magn. Reson. 142, 372 (2000).
F. Noack, NMR Field-cycling spectroscopy: principles and applications, Prog. Nucl. Magn. Reson. Spectrosc. 18, 171 (1986).
E. Anoardo, G. Galli y G. Ferrante, Fast field cycling NMR: Applications and Instrumentation, Appl. Magn. Reson. 20, 365 (2001).
R. Kimmich y E. Anoardo, Field cycling NMR relaxometry, Prog. Nucl. Magn. Reson. Spectrosc. 44, 257 (2004).
P. Morris, Nuclear Magnetic Resonance Imaging in Medicine and Biology, Clarendon Press, Oxford (1986).
E. M. Haacke, R. W. Brown, M. R. Thompson y R. Venkatesan, Magnetic Resonance Imaging: Physical Principles and Sequence Design, Wiley, New York (1999).

B. Blümich, NMR Imaging of Materials, Clarendon Press, Oxford (2000).
M. T. Vlaardingerbroek y J. A. den Boer, Magnetic Resonance Imaging: Theory and Practice, Springer, Berlin (2003).
Artículos varios.

MODALIDAD DE EVALUACIÓN

Examen escrito.

REQUERIMIENTOS PARA EL CURSADO

Los alumnos deben haber cursado o aprobado un curso introductorio o una especialidad de RMN.

TÍTULO: Ingeniería de atributos y modelos para el aprendizaje automático			
AÑO: 2024	CUATRIMESTRE: 2°	N° DE CRÉDITOS:	VIGENCIA: 3 años
CARGA HORARIA: 60 horas de teoría y 30 horas de práctica			
CARRERA/S: Doctorado en Ciencias de la Computación			

FUNDAMENTOS

El aprendizaje automático (ML, del inglés Machine Learning) es una tecnología desarrollada a partir de la confluencia de intereses en la intersección de las Ciencias de la Computación con la Estadística y la Matemática Aplicada.

Al presente, esta tecnología permea todos los campos de la ciencia y la industria en los cuales se procesan datos para verificar hipótesis, hacer predicciones y fundamentar conclusiones. Este es el caso no sólo de las ciencias naturales como la Astronomía, la Física, la Química, la Biología o las Ciencias de la Tierra y la Atmósfera, las cuales nacieron a partir de la sistematización de datos obtenidos de observaciones y mediciones en laboratorio, sino que incluso en las ciencias humanas como la Psicología y Sociología se encuentra cada vez mayor uso de esta tecnología computacional.

Por su parte, es ya una práctica establecida en la industria la recolección de datos en las diferentes instancias del ciclo de un producto (sea material o virtual) para detectar patrones y hacer predicciones.

ML es en su práctica básicamente ingeniería de los atributos que caracterizan los datos y ajuste fino de los modelos que se implementan. Estas operaciones de ingeniería son muy demandantes en tiempo y requieren de conocimiento experto para que su implementación aseguren el éxito de un proyecto basado en aprendizaje automatizado.

En las áreas relacionadas a la visión por computadora (CV, del inglés computer vision) o el lenguaje natural (NLP, del inglés natural language processing) es común manejar muy grandes volúmenes de datos, lo que ha dado lugar a la subdisciplina específica del aprendizaje profundo (DL, del inglés deep learning), donde parte de la ingeniería de atributos está su vez automatizada.

Pero más allá del éxito y los logros del DL en CV y NLP, lo usual sin embargo en ciencia e industria es manejar conjuntos de datos estructurados de tamaño que no son lo suficientemente grande como para poder aplicar técnicas de DL y las nociones de ingeniería de atributos y modelos continua siendo de implementación necesaria al presente.

OBJETIVOS

Objetivo general:

Ingeniería de atributos y modelos es usualmente sólo mencionada o directamente ignorada en los cursos introductorios a aprendizaje automático, ya sea por razones de tiempo o porque la complejidad de su naturaleza compite con la exposición didáctica en un primer curso donde se presentan los fundamentos de la tecnología.

Este curso se ofrece como continuación para aquellos que habiendo completado un primer

curso de redes neuronales o de introducción a aprendizaje automático quieren profundizar sobre la implementación de la tecnología en la práctica.

El curso propone una aproximación integral desde una perspectiva aplicada a los desafíos de ingeniería mencionados. El enfoque pretendido es agnóstico en lo disciplinar, de forma que los contenidos puedan ser aplicados con uso indistinto en cualquier proyecto basado en datos ya sea en ciencia como en industria.

Objetivos específicos:

- Presentar y desarrollar las técnicas de ingeniería usuales en la práctica del ML.
- Conocer las técnicas usuales para preparar datos para ML.
- Identificar las operaciones usuales para sintonizar los modelos de ML.
- Conocer las funcionalidades ofrecidas por la librería scikit-learn.
- Presentar las bases de DL y el uso de TensorFlow a través de Keras.

PROGRAMA

Unidad I: El ciclo de ML y sus modelos clásicos

CRISP_DM, Catálogo de modelos de clasificación y regresión en ML y revisión de sus fundamentos. Árbol de decisión. Regresión lineal y logística. Perceptrón. Máquinas de vectores soporte (SVM). Métodos de kernel.

Unidad II: Preprocesamiento de datos

Datos faltantes: eliminación, imputación. Datos categóricos: one-hot encoding and dummy encoding. Hashing. Estandarización. Partición de los datos: Entrenamiento, validación y test.

Unidad III: Compresión y reducción de dimensionalidad

Selección de atributos. Métodos supervisados: eliminación back and forward. Penalización por regularización (L1 y L2). Método no supervisados: Análisis de componentes principales (PCA). kernel PCA.

Unidad IV: Evaluación y ajuste de hiperparámetros

Buenas prácticas de evaluación. Clasificación binaria y multiclase. Imbalance de clases. Validación cruzada. Curvas de validación. Distinción entre parámetros e hiperparámetros. Búsqueda de hiperparámetros en grilla.

Unidad V: Aprendizaje en ensamble

Combinación de métodos y regla de la mayoría. Bagging y boosting. AdaBoost.

Unidad VI: Redes neuronales multicapa

Backpropagation. Implementación y entrenamiento de una red neuronal. Paralelización del entrenamiento con TensorFlow. Funciones de activación.

Unidad VII: Redes neuronales convolucionales (CNN)

Jerarquía de atributos. Implementación de una CNN. Deep CNN con TensorFlow.

PRÁCTICAS

Las clases prácticas se dictan en un entorno de Jupiter Lab usando la cuenta institucional de

Google colab. La implementación se lleva a cabo usando Python como lenguaje de scripting para invocar las librerías estandarizadas de NumPy, SciKit-learn y TensorFlow a través de la interfaz Keras.

En curso consta de una tarea en cada unidad de dictado, la cual requiere de la implementación de código para el procesamiento, análisis y discusión de resultados.

BIBLIOGRAFÍA

Bibliografía básica:

S. Raschka and V. Mirjalili, Python Machine Learning, Packt Publishing; 3rd ed (2019).

P. Dobue, The Art of Feature Engineering: Essentials for Machine Learning, Cambridge University Press; 1st edition (2020).

S. Marsland, Machine Learning: An Algorithmic Perspective, CRC Press, 2nd ed (2015).

Bibliografía complementaria:

Wang He and Peng Liu, Machine Learning Contests: A Guidebook, Springer Nature Singapore (2023).

Alice Zheng and Amanda Casari, Feature Engineering for Machine Learning, O'Reilly Media (2018).

T.M. Mitchell, Machine Learning, McGraw-Hill (1997).

MODALIDAD DE EVALUACIÓN

Las tareas de todas las unidades requieren de una entrega con plazos estipulados en el transcurso del dictado y deben ser aprobadas. Adicionalmente cada estudiante desarrolla un proyecto personal integrador en un área o disciplina a su elección para la aplicación integral de los contenidos del curso, cuya entrega con informe también debe ser aprobada en una instancia oral.

REQUERIMIENTOS PARA EL CURSADO

Acreditar conocimientos equivalentes al de un curso introductorio al aprendizaje automático o redes neuronales.

Acreditar conocimientos a nivel intermedio o avanzado de programación en Python, Pandas y las librerías gráficas Matplotlib y Seaborn.

El curso es autocontenido en cuanto a los contenidos de matemática que se requieren pero se basa en el conocimiento de álgebra cálculo, probabilidad y estadística a nivel de grado.

TÍTULO: Instrumentación de resonancia magnética nuclear			
AÑO: 2024	CUATRIMESTRE: 2°	N° DE CRÉDITOS: 1	VIGENCIA: 3 años
CARGA HORARIA: 20 horas de teoría y 5 horas de práctica			
CARRERA/S: Doctorado en Física			

FUNDAMENTOS

El conocimiento básico de la instrumentación asociada a un aparato de RMN es un punto de partida esencial para comprender cómo hacer el mejor uso del mismo. Cuando la naturaleza del trabajo experimental implica modificaciones o adaptaciones de hardware, el conocimiento de las partes que lo componen y sus funciones se torna crítica. El diseño experimental que involucra instrumentación, requiere que el físico experimental adquiera un conocimiento de base que le permita interactuar eficientemente con el personal técnico profesional de apoyo.

OBJETIVOS

Instruir en los conceptos relevantes asociados a la instrumentación de RMN. El curso contempla el análisis de las partes que son comunes a todo instrumento de RMN, como son la cadena de transmisión, la cadena de recepción, las sondas y las diferentes estrategias de generación de campo magnético. El curso se enfoca en tecnología de RMN asociada a campos magnéticos de baja intensidad (menores a 0.5T). Se contempla tanto la tecnología estándar, como aquella específica de técnicas de RMN con campo magnético ciclado e imágenes.

PROGRAMA

Unidad I: Instrumentación básica para un experimento de RMN

Diagrama en bloques de un aparato de RMN básico. Funciones de cada bloque. Cadena de transmisión. Cadena de recepción. Sondas y bobinas de RF. Imanes y electroimanes.

Unidad II: Técnicas de RMN con campo magnético ciclado

La técnica de campo magnético ciclado. Experimentos típicos. Diagrama en bloques de un sistema completo. Consideraciones técnicas. Especificaciones críticas del ciclo de campo. Limitaciones de carácter técnico. Limitaciones asociadas a propiedades de la muestra.

Unidad III: Instrumentación específica para la generación de campos pulsados

Electroimanes de conmutación rápida. Administración de potencia. Dispositivos de potencia para el control de la corriente. Control de la corriente & campo. Compensación del campo magnético.

Unidad IV: Instrumentación para imágenes

Codificación espacial y gradientes. Bobinas de gradientes. Tecnología de imágenes a campos de baja intensidad. Tecnología de imágenes con campo magnético ciclado.

PRÁCTICAS

Identificación y demostración de las funciones de partes de hardware. Caracterización. Se aprueba con informes.

BIBLIOGRAFÍA

E. Fukushima y S. Roederer, Experimental Pulse NMR, Addison-Wesley, London (1981).

F. Noack, NMR Field-cycling spectroscopy: principles and applications, Prog. Nucl. Magn. Reson. Spectrosc. 18, 171 (1986).
E. Anoardo, G. Galli y G. Ferrante, Fast field cycling NMR: Applications and Instrumentation, Appl. Magn. Reson. 20, 365 (2001).
M. Lupu, A. Briguet y J. Mispelter, NMR Probeheads: For Biophysics and Biomedical Experiments, Imperial College Press, London (2006).
Magnetic Resonance Technology: Hardware and Component System Design A. G. Webb Ed., RSC, Croydon (2016).
Artículos varios.

MODALIDAD DE EVALUACIÓN

Examen escrito.

REQUERIMIENTOS PARA EL CURSADO

Los alumnos deben haber cursado o aprobado un curso o especialidad introductorio a la RMN.

TÍTULO: Interacción de la radiación con la materia			
AÑO: 2024	CUATRIMESTRE: 2°	N° DE CRÉDITOS: 3	VIGENCIA: 3 años
CARGA HORARIA: 60 horas de teoría y 30 horas de práctica			
CARRERA/S: Doctorado en Física			

FUNDAMENTOS

La asignatura Interacción de la radiación con la materia es un curso introductorio a los distintos fenómenos físicos relacionados con la interacción de fotones, en el rango de energía de los rayos X y gamma, partículas cargadas y neutrones con la materia, y a los diferentes sistemas de detección y fuentes de radiación. El marco teórico de este curso provee a aquellos alumnos que desean especializarse en el área de espectroscopía de radiaciones ionizantes, del conocimiento básico para poder iniciar actividades de investigación en el tema. Por su parte, los trabajos prácticos de laboratorio tienen como objetivo contribuir a mejorar la formación de los alumnos en el aspecto experimental y proporcionarles un entrenamiento básico para poder desarrollar experimentos en el área de espectroscopía de rayos X y gamma. El contenido de este curso, en alguno de sus puntos, incorpora elementos modernos de la física de radiaciones con el fin de proveer a los alumnos de una descripción más realista y actual de los distintos procesos de interacción de fotones y partículas subatómicas con la materia y al mismo tiempo acercarlos a las diversas técnicas espectroscópicas que actualmente se utilizan en investigación.

OBJETIVOS

Proveer a los alumnos una introducción sobre los distintos fenómenos físicos relacionados con la interacción de fotones, en el rango de energía de los rayos X y gamma, partículas cargadas y neutrones con la materia, y a los diferentes sistemas de detección y fuentes de radiación.

PROGRAMA

Unidad I: Unidad I: Fotones (rayos X y gamma)

Sección eficaz de interacción. Sección eficaz total y diferencial. Distintos tipos de interacción. Absorción fotoeléctrica. Sección eficaz. Distribución angular de fotoelectrones. Estructura fina de los bordes de absorción. Dicroísmo circular magnético de rayos x. Ejemplos de técnicas espectroscópicas basadas en la absorción de rayos X. Ejemplos de técnicas espectroscópicas basadas en la detección de fotoelectrones. Procesos de desexcitación atómica. Fluorescencia de rayos x. Procesos Auger. Transiciones Coster–Kronig. Producción de fluorescencia de rayos X, probabilidad de transición Auger y Coster–Kronig. Ancho energético de estados de vacancia en niveles atómicos. Ancho natural de líneas de emisión. Ejemplos de técnicas espectroscópicas basadas en la desexcitación radiativa de átomos. Dispersión elástica. Dispersión por un electrón libre. Teoría clásica. Sección eficaz de Thomson. Dispersión por un átomo aislado. Teoría clásica. Factor de forma atómico. Tratamiento cuántico de la sección eficaz de interacción. Dispersión por una molécula. Factor de forma molecular. Dispersión por un cristal. Amplitud de dispersión. Formulación de von Laue y de Bragg. Factor de estructura geométrico. Dispersión por electrones ligados. Teoría clásica de la dispersión de radiación electromagnética por un electrón ligado. Factor de dispersión anómala. Correcciones por dispersión al factor de forma atómico. Ejemplos de técnicas espectroscópicas basadas en la dispersión elástica de rayos X. Dispersión inelástica. Diferentes regímenes de la dispersión inelástica de fotones. Dispersión Compton por un electrón libre y en reposo. Cinemática del proceso de colisión. Sección eficaz de Klein–Nishina. Sección eficaz no relativista. Dispersión

Compton por un átomo aislado. Función de dispersión incoherente. Dispersión Compton por electrones en movimiento. Cinemática del proceso de colisión. Sección eficaz. Perfil Compton. Ejemplos de técnicas espectroscópicas basadas en la dispersión inelástica de rayos X. Producción de pares e-e+. Umbral de energía para la producción de pares. Producción de pares en el campo nuclear. Producción de pares en el campo de un electrón. Sección eficaz total. Sección eficaz total de interacción. Probabilidad de interacción. Coeficiente de atenuación. Atenuación de fotones. Camino libre medio. Coeficiente de atenuación para compuestos.

Unidad II: Unidad II: Electrones y positrones

Dispersión elástica. Dispersión Coulombiana por un núcleo. Dispersión Coulombiana por un átomo neutro. Sección eficaz total. Dispersión inelástica. Fórmula de Bethe para el poder de frenado. Corrección por efecto de capas y por efecto de densidad. Emisión de radiación de frenado. Colisiones radiativas con núcleos. Colisiones radiativas con electrones. Sección eficaz total. Poder de frenado radiativo. Poder de frenado total. Rango. Aniquilación de positrones. Tiempo medio de vida. Distribución angular de la radiación de aniquilación. Formación de positronio. Modos de decaimiento. Aplicaciones.

Unidad III: Unidad III: Neutrones

Neutrones. Distintos tipos de interacción. Dispersión de neutrones térmicos. Sección eficaz. Longitud de dispersión. Dispersión coherente e incoherente.

Unidad IV: Unidad IV: Detectores de radiación

Propiedades generales de los detectores de radiación. Resolución en energía. Eficiencia de detección. Tiempo muerto. Modelo paralizable y no paralizable. Detectores gaseosos. Cámara de ionización. Contador proporcional. Detectores de centelleo. Tubo fotomultiplicador. Detectores semiconductores.

Unidad V: Unidad V: Fuentes de radiación

Fuentes de radiación. Radioisótopos. Modos de decaimiento. Fuentes radiactivas. Tubo de rayos X. Aceleradores. Radiación de sincrotrón.

Unidad VI: Unidad VI: Dosimetría de radiaciones

Cantidades dosimétricas. Niveles de radiación. Protección radiológica.

PRÁCTICAS

Se realizarán algunos trabajos prácticos de laboratorio en el LAMARX, supervisados por el docente a cargo. Además, se entregarán a los alumnos guías de problemas para que resuelvan individualmente y consulten al docente.

BIBLIOGRAFÍA

Jens Als-Nielsen y Des McMorrow, Elements of Modern X-Ray Physics (John Wiley & Sons, 2001).
N.J. Carron, An Introduction to the Passage of Energetic Particles through Matter (Taylor & Francis, 2006).
S.-H. Chen y M. Kotlarchyk, Interactions of Photons and Neutrons with Matter (World Scientific, 2007).
Glenn F. Knoll, Radiation Detection and Measurement (John Wiley & Sons, 2000).

William R. Leo, Techniques for Nuclear and Particle Physics Experiments (Springer-Verlag, 1992).
G.L. Squires, Introduction to Theory of Thermal Neutron Scattering (Dover Publications, 1996).

MODALIDAD DE EVALUACIÓN

Para alcanzar la regularidad los alumnos deberán aprobar la totalidad de las prácticas de laboratorio (con posibilidad de recuperar) y asistir al 80% de las clases.

REQUERIMIENTOS PARA EL CURSADO

Conocimientos básicos sobre mecánica cuántica y mecánica clásica.

TÍTULO: Interacción nubes-aerosoles, impacto de la actividad humana			
AÑO: 2024	CUATRIMESTRE: 2°	N° DE CRÉDITOS: 3	VIGENCIA: 3 años
CARGA HORARIA: 60 horas de teoría y 20 horas de práctica			
CARRERA/S: Doctorado en Física			

FUNDAMENTOS

Las nubes tienen una gran incidencia sobre: el ciclo hidrológico, el balance energético del sistema Tierra-Sol-Atmósfera, la circulación general de la atmósfera, la transferencia de calor y humedad a la alta atmósfera, el circuito eléctrico global y el clima global. Cambios en la distribución espacial/temporal de las precipitaciones pueden tener impactos dramáticos en el clima y en la sociedad.

La precipitación está directamente relacionada a la dinámica de las nubes y también a los procesos microfísicos los cuales están íntimamente asociados a un tipo particular de aerosoles atmosféricos. Uno de los factores que puede contribuir a la modificación de las nubes y la precipitación es la variación de la concentración de aerosoles principalmente a través de la actividad humana.

El conocimiento de la evolución de las concentraciones de aerosoles en la atmósfera y la influencia que estos tienen en los procesos microfísicos es fundamental para entender la formación, desarrollo, evolución y duración de las nubes y sus efectos en el clima.

OBJETIVOS

El curso tiene como objetivos principales:

- * Hacer una revisión de lo que actualmente se conoce sobre la concentración de aerosoles en la atmósfera, su composición y evolución espacio-temporal.
- * Hacer una revisión de las complejas interacciones entre aerosoles y nubes y los mecanismos que conducen a la formación, desarrollo, evolución y duración de las nubes.
- * Estudiar la evidencia observacional de la interacción nubes-aerosoles y el impacto en el clima global
- * Analizar las bases microfísicas para la modificación artificial de las nubes, los proyectos realizados y los resultados obtenidos.

PROGRAMA

Unidad I: Nubes

Formación de las nubes. Tipo de nubes. Climatología de las nubes. Efectos de las nubes en el balance radiativo entre nuestro planeta y el Sol. Fuentes antropogénicas de humedad y nubosidad. Formación de nubes por estelas inducidas.

Unidad II: Aerosoles

Formación y tipo de aerosoles. Climatología de los aerosoles. Fuentes y procesos de los aerosoles. Distribución de tamaños y propiedades ópticas de los aerosoles. Núcleos de condensación de nubes. Núcleos de hielo. Efectos de los aerosoles en la radiación solar y terrestre. Efectos directos de los aerosoles en el clima.

Unidad III: Interacción nubes-aerosoles

Fundamentos microfísicos de las interacciones nubes-aerosoles. Evidencia observacional de las interacciones nubes-aerosoles. Forzamiento asociado con ajustes en las nubes líquidas y

nubes frías. Hipótesis de Warner & Twomey. Impacto de los rayos cósmicos en aerosoles y nubes. Procesos subyacentes a los cambios de precipitación. Gestión de la radiación solar y métodos relacionados.

Unidad IV: Capa límite atmosférica

Balance de energía en la superficie. Ciclo diurno de la capa límite. Capa superficial. Estabilidad. Capa límite urbana. Dispersión de contaminantes.

Unidad V: Modificación artificial de las nubes

Bases de la modificación artificial por sembrado de nubes frías. Proyecto CIRRUS. Sembrado por modo estático: Conceptos fundamentales, proyectos, resultados. Sembrado por modo dinámico: Conceptos fundamentales, proyectos, resultados. Formación crecimiento y desarrollo de granizos en nubes ordinarias, multiceldas y superceldas. Conceptos fundamentales de la supresión de granizos, glaciación y competición de embriones, proyectos y resultados.

Bases de la modificación artificial por sembrado de nubes cálidas: Conceptos fundamentales, proyectos, resultados.

Bases de la modificación artificial por sembrado de huracanes: Conceptos fundamentales, proyectos, resultados.

Efecto de las estelas de aviones.

PRÁCTICAS

realización y presentación de seminarios basados en una publicación (o conjunto de ellas) representativo de los contenidos del curso.

BIBLIOGRAFÍA

- Aerosol Pollution Impact on Precipitation. A Scientific Review. Editors: Zev Levin, William R. Cotton. Springer 2009.
- Human Impacts on Weather and Climate. 2nd Edición. William R. Cotton, Roger A. Pielke. Cambridge 2007.
- Atmospheric Science for Environmental Scientists, 2nd Edition, Andrea V. Jackson, C. Nick Hewitt. Wiley 2019
- Clouds and Aerosols. In: Climate Change 2013: The Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Fifth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change. Boucher, O., D. Randall, P. Artaxo, C. Bretherton, G. Feingold, P. Forster, V.-M. Kerminen, Y. Kondo, H. Liao, U. Lohmann, P. Rasch, S.K. Satheesh, S. Sherwood, B. Stevens and X.Y. Zhang, 2013: [Stocker, T.F., D. Qin, G.-K. Plattner, M. Tignor, S.K. Allen, J. Boschung, A. Nauels, Y. Xia, V. Bex and P.M. Midgley (eds.)]. Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom and New York, NY, USA. 2013.

MODALIDAD DE EVALUACIÓN

Evaluación continua mediante realización y presentación de seminarios basados en una publicación (o conjunto de ellas) representativo de los contenidos del curso. Para regularizar se necesita aprobar tres seminarios. Para aprobar el curso, debe presentar un trabajo final

integrador sobre los temas del programa.

REQUERIMIENTOS PARA EL CURSADO

Tener conocimiento de física de nubes y de procesos microfísicos en nubes.

TÍTULO: Introducción a la teoría de conexiones y holonomía			
AÑO: 2024	CUATRIMESTRE: 2°	N° DE CRÉDITOS: 3	VIGENCIA: 3 años
CARGA HORARIA: 60 horas de teoría y 60 horas de práctica			
CARRERA/S: Doctorado en Matemática, Doctorado en Física			

FUNDAMENTOS

La teoría de conexiones en fibrados principales y vectoriales es una herramienta básica y necesaria para la geometría diferencial moderna. Sus orígenes se remontan a Elie Cartan, a principios del siglo pasado. Actualmente es el lenguaje común de casi toda teoría moderna en el área y las estructuras geométricas quedan en general descritas por la reducción de la estructura del fibrado principal de marcos a un subfibrado adecuado. Aparece el concepto importante de subfibrado de holonomía.

OBJETIVOS

Luego de dar nociones preliminares, introducir a los alumnos a la teoría de fibrados principales, vectoriales y asociados. Estudiar conexiones en estos fibrados y la relación entre las diferentes formas, equivalentes, de introducir las conexiones. Estudiar la curvatura y lo denominados grupos y subfibrados de holonomía

PROGRAMA

Unidad I: Preliminares.

Campos vectoriales y flujos. Grupos de Lie y espacios cocientes por órbitas de grupos de Lie que actúan libremente en una variedad. Espacios homogéneos.

Unidad II: Espacios fibrados

Fibrados vectoriales, principales y asociados. Fibrado pull-back. Ejemplos clásicos.

Unidad III: Teoría de conexiones

Conexiones en fibrados principales y vectoriales. Conexión inducida en fibrados vectoriales asociados y en fibrados pull-back.

Unidad IV: Operadores de conexión

Operadores de conexión en fibrados vectoriales

E sobre la variedad M y su relación con

las conexiones como distribución del espacio tangente TE . Ejemplos, conexión de Levi-Civita.

Unidad V: Transporte paralelos y curvatura

Transporte paralelo y curvatura. El teorema de Ambrose-Singer.

Unidad VI: Grupos de holonomía

El grupo de holonomía y la reducción de la conexión al subfibrado de holonomía.

PRÁCTICAS

El alumno debe resolver los ejercicios propuestos y entregar algunos de ellos para su corrección

BIBLIOGRAFÍA

- Walter Poor, Differential Geometric Structures, Dover Publications Inc, New York, 1981.
- Berndt, J., Console, S., and Olmos, C., Submanifolds and Holonomy, Monographs and Research Notes in Mathematics, CRC-Press, Chapman and Hall, Second Edition 2016.
- Miatello, R., and Olmos, C., Geometría de Espacios Fibrados, Trabajos de Matemática, FaMAF (1988).
- Olmos, C., Notas de curso.

MODALIDAD DE EVALUACIÓN

- 1) Presentación de ejercicios resueltos (aprobación de la parte práctica)
- 2) Examen Final (individual)

REQUERIMIENTOS PARA EL CURSADO

Conocimiento básico de geometría diferencial y de la teoría de variedades diferenciables.

TÍTULO: Materia Activa			
AÑO: 2024	CUATRIMESTRE: 2°	N° DE CRÉDITOS: 3	VIGENCIA: 3 años
CARGA HORARIA: 60 horas de teoría y 60 horas de práctica			
CARRERA/S: Doctorado en Matemática, Doctorado en Física			

FUNDAMENTOS

La Materia activa refiere a sistemas de partículas que poseen la capacidad de autopropulsarse. Estos sistemas abundan en la naturaleza principalmente como conjuntos de agentes vivos susceptibles de ser estudiados con los métodos de la mecánica estadística. Pero, todavía no disponemos de una teoría para la materia activa, dado que esta no posee cantidades conservadas conocidas, está fuera del equilibrio y no cumple con algunos principios de la física, siendo así, un objeto de estudio ideal para extender los alcances de esta. Por esto, la materia activa se encuentra a la vanguardia de la investigación contemporánea, tanto en el aspecto teórico como en el aplicado, generando nuevas herramientas matemáticas, computacionales y experimentales.

En este curso se repasaremos los resultados más destacados de los 30 años de desarrollo en el campo de la materia activa. Presentaremos los sistemas naturales y los experimentos más relevantes. Mostraremos los diferentes enfoques teóricos con que se intenta describir a la materia activa y su relación entre ellos y las herramientas matemáticas y computacionales empleadas tanto en el estudio en laboratorio como en el modelado teórico. Finalmente abordaremos las características más inusuales y difíciles de describir de la materia activa para las cuales sólo existen conjeturas sobre el camino a seguir.

OBJETIVOS

El objetivo del curso es que el estudiante posea, al finalizarlo, un conocimiento general de los resultados experimentales más relevantes como así también, las técnicas y metodologías que llevan adelante el desarrollo actual de la disciplina.

Al estudiante debería ser capaz de:

Identificar los métodos de artículos o charlas específicos.

Reconocer a los autores principales y relacionar sus colaboraciones.

Reproducir resultados elementales e interpretarlos.

Comentar y justificar un resultado que le sea de interés.

PROGRAMA

Unidad I: Fundamentos

Materiales pasivos. Sistemas en equilibrio. Violación del teorema de Mermin-Wagner. Materia viva y materiales activos. Modelos microscópicos: El modelo de Vicsek. Modelos fenomenológicos: Modelo de Toner y Tu. Transiciones de fase activas. Fluctuaciones gigantes de la densidad.

Unidad II: Sistemas naturales y experimentales.

Correlaciones en bandadas de estorninos. Interacciones en sistemas biológicos: métricas, topológicas, asimétricas, ferromagnéticas, nemáticas. Cardúmenes. Rebaños de ovejas y otros ungulados. Insectos. Partículas de Jano. Quinke rollers. Microswimmers.

Unidad III: Modelado computacional

Ecuaciones de Langevin en materia activa. Fuerzas no conservativas y cantidades no conservadas. Método de Euler-Maruyama. Diferencia entre los métodos iterativos. Interacciones ferromagnéticas, nemáticas y sociales. MIPS y movimiento colectivo.

Unidad IV: Modelos teóricos

Ecuaciones macroscópicas, fenomenológicas y promediadas. Cálculo de Ito. Estabilidad del estado homogéneo. Ecuaciones de Chan-Hilliard y modelos Phi. Transiciones de fase de primer orden. Modelos basados en Orstein-Uhlenbeck

Unidad V: Resultados antiintuitivos

Ruptura del principio de acción y reacción. Líneas de tráfico, peatones, células confinadas, quimiotaxis. Violación del Teorema del Límite Central. Termodinámica estocástica.

PRÁCTICAS

Las clases prácticas consistirán en la exposición por parte de un alumno de algún artículo que motive la discusión de los conceptos abordados. Además, por cada unidad, se pedirá realizar algunos cálculos y/o simulaciones sencillos que deberán ser entregados para su corrección.

BIBLIOGRAFÍA

A modern course in statistical physics 2ed, Reichl, Springer (1998)
Stochastic Processes in Physics and Chemistry, van Kampen, North-Holland (1992)
The Physics of Flocking, Toner, Cambridge University Press (2024)
<https://softmatterbook.online/9-active-matter>
Active Brownian Particles, Romanzuck et al. Review Eur. Phys. J. Special Topics 202, 1–162 (2012)
Extractos de varios artículos científicos de relevancia.

MODALIDAD DE EVALUACIÓN

La regularidad se obtiene con la entrega de los trabajos realizados en cada unidad teniendo que aprobarse al menos tres de los mismos.
El examen final de la materia consistirá en realizar un trabajo integrador, basado en algún artículo publicado o tema de interés, que deberá ser expuesto el día del examen frente al tribunal.

REQUERIMIENTOS PARA EL CURSADO

Conocimientos generales, pero no excluyentes, sobre análisis matemático, ecuaciones diferenciales, métodos numéricos, mecánica y programación. Dada la variedad de problemas y enfoques que posee el tema de estudio, los problemas específicos se adaptarán al conocimiento e interés de los estudiantes.

TÍTULO: Minería de datos para texto			
AÑO: 2024	CUATRIMESTRE: 2°	N° DE CRÉDITOS: 3	VIGENCIA: 3 años
CARGA HORARIA: 60 horas de teoría y 60 horas de práctica			
CARRERA/S: Doctorado en Ciencias de la Computación			

FUNDAMENTOS

En esta materia se presentan métodos y técnicas de análisis exploratorio de datos y aprendizaje no supervisado con especial atención a sus aplicaciones en procesamiento del lenguaje natural. Se proveen los fundamentos teóricos y metodológicos de aproximaciones como las reglas de asociación, clustering o embeddings, y se desarrollan aplicaciones prácticas de estas técnicas en diferentes problemas de procesamiento del lenguaje natural. Se aborda la cuestión de la evaluación en aprendizaje no supervisado, y se proveen diferentes métodos para ello.

OBJETIVOS

Al finalizar el curso los estudiantes habrán adquirido los fundamentos de las técnicas de aprendizaje no supervisado; habrán desarrollado o consolidado conocimientos sobre aprendizaje automático en general; se habrán familiarizado con el procesamiento del lenguaje natural, problemas clásicos del área y el amplio rango de soluciones que se pueden desplegar sobre esos problemas. Tendrán la capacidad de leer y entender artículos científicos del área, y de evaluar diferentes opciones para un problema y un contexto dados.

PROGRAMA

Unidad I: Unidad I: Introducción a la minería de datos, análisis exploratorio de datos, aprendizaje no supervisado

Inteligencia artificial, aprendizaje automático, aprendizaje supervisado y no supervisado. Minería de datos. Aprendizaje semi-supervisado.

Unidad II: Unidad II: Introducción al procesamiento del lenguaje natural

El lenguaje natural como objeto de estudio. Aplicaciones del tratamiento automático del lenguaje natural. Análisis por niveles del lenguaje natural. Generación. Métodos no supervisados para delimitar palabras, crear y enriquecer lexicones, análisis morfológico, análisis sintáctico y semántico.

Unidad III: Unidad III: Evaluación

Métricas. Limitaciones y fortalezas de las métricas. Concursos abiertos. Testbeds. Complemento entre análisis cualitativo y cuantitativo.

Unidad IV: Unidad IV: Reglas de asociación y Clustering

Correlación, significatividad. Diferentes formas de clustering: aglomerativo, jerárquico. Distancias. Combinaciones. Clustering como embedding.

Unidad V: Unidad VI: Modelos de Lenguaje y Embeddings

Reducción de dimensionalidad y acercamiento a causas latentes mediante métodos proyectivos. PCA. ICA. Autoencoders. Embeddings neuronales. Embeddings de modelos de lenguaje. Modelos de lenguaje,

Unidad VI: Unidad VI: El entorno de los aprendizajes automáticos

Representation learning. Transfer learning. Weak supervision.

Unidad VII: Unidad VII: Cuestiones éticas

Inteligencia artificial responsable. Ética de la inteligencia artificial. Impactos sociales y ambientales. Equidad y sesgo. Métricas de equidad. Exploraciones.

PRÁCTICAS

Se realizarán dos trabajos prácticos comunes a todos los estudiantes, uno sobre clustering y otro sobre embeddings, con consigna y objetivos comunes pero conjunto de datos a elección. Cada uno tendrá fecha de entrega 2 semanas después de que se comunica la consigna. En la segunda parte del curso se realizará un proyecto individual de investigación, con seguimiento semanal individualizado. Al final del curso se presentará oralmente el proyecto, un informe y el repositorio público.

BIBLIOGRAFÍA

R. Barzilay, K. McKeown. 2001. Extracting Paraphrases from a Parallel Corpus. {it Proceedings of the Meeting of the Association for Computational Linguistics 2001}

D. Brown et al. 1993. The Mathematics of Statistical Machine Translation. Computational Linguistics, 1993.

K. Church, P. Hanks. 1990. Word Association Norms, Mutual Information, and Lexicography. Computational Linguistics Vol. 16 (1), pp.22-29-

I. Goodfellow, Y. Bengio y A. Courville (2016). Deep Learning. MIT Press

T.K. Landauer, S.T. Dumais. 1997. A Solution to Plato's Problem: The Latent Semantic Analysis: Theory of Acquisition, Induction and Representation of Knowledge. Psychological Review

C. Manning, H. Schütze. 1999. Foundations of Statistical Natural Language Processing}. MIT Press.

NIST/SEMATECH e-Handbook of Statistical Methods, <http://www.itl.nist.gov/div898/handbook>

D. Yarowsky. 1997. Unsupervised Word Sense Disambiguation Rivaling Supervised Methods. Proceedings of the Meeting of the Association for Computational Linguistics 1997

MODALIDAD DE EVALUACIÓN

Regularidad: entrega de dos informes de trabajos prácticos.

Aprobación: entrega de los tres informes (dos trabajos prácticos y un proyecto) y defensa oral del proyecto, que incluye examen oral con preguntas sobre el resto de la materia.

REQUERIMIENTOS PARA EL CURSADO

Conocimientos de probabilidad y estadística, conocimientos avanzados de programación

TÍTULO: Simulaciones micromagnéticas aplicadas al diseño y estudio de nanoestructuras			
AÑO: 2024	CUATRIMESTRE: 2°	N° DE CRÉDITOS: 3	VIGENCIA: 3 años
CARGA HORARIA: 60 horas de teoría y 60 horas de práctica			
CARRERA/S: Doctorado en Física			

FUNDAMENTOS

Los materiales ferromagnéticos, masivos y de baja dimensionalidad, exhiben propiedades interesantes, tales como la demagnetización ultrarrápida, la magnetización en el rango de los picosegundos y la dinámica precesional, de interés para diversas aplicaciones. Estas propiedades incluyen también procesos más lentos, como son el proceso de reversión de la magnetización, la dinámica de las paredes de dominio y la dinámica de los vórtices magnéticos. En particular, la teoría del Micromagnetismo, desarrollada por Landau, Lifschitz y Brown (1935-1940), permite describir los procesos de magnetización y las propiedades características del ciclo de histéresis de materiales ferromagnéticos nanoestructurados. Asimismo, estas propiedades magnéticas, estáticas y dinámicas de los elementos ferromagnéticos, están determinadas por la contribución relativa de diferentes términos energéticos. Algunas herramientas que permiten resolver las ecuaciones micromagnéticas para estructuras magnéticas de baja dimensionalidad son los programas numéricos OOMMF (de las siglas Object Oriented MicroMagnetic Framework) y Mumax, los cuales resuelven las ecuaciones de Landau- Lifschitz- Gilbert (LLG) mediante el método de diferencias finitas. En este curso se brindan los conocimientos mínimos necesarios para abordar el diseño y caracterización magnética de sistemas nanoestructurados, variados en composición y morfología, que permiten comprender sus comportamientos para aplicaciones nanotecnológicas en diferentes disciplinas.

OBJETIVOS

- Introducir conceptos básicos sobre el micromagnetismo de estructuras uni, bi y tridimensionales, de interés actual en diversas aplicaciones nanotecnológicas. Para ello, se emplearán herramientas de cálculo numérico en 2D y 3D, con el objetivo particular de entrenar a los/as alumnos/as en el uso de programas (OOMMF y MUMAX), que se usan actualmente para la resolución de estructuras magnéticas.
- Introducir conceptos básicos de skyrmions magnéticos y su modelamiento en micromagnetismo, implementando la interacción de Dzyaloshinskii–Moriya superficial.
- Presentar los fundamentos sobre resonancia magnética en distintas estructuras magnéticas (skyrmions, hopfions, etc.), con diámetros modulados.
- Resolver y exponer los trabajos prácticos propuestos por los docentes del curso, en formato póster.

PROGRAMA

Unidad I: Principios y fundamentos del Micromagnetismo

Breve repaso de conceptos fundamentales de materiales magnéticos. 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. Micromagnetismo y aprendizaje automático: computación de nanoestructuras magnéticas. Micromagnetismo y electroquímica: aplicaciones en sensado molecular. Actividades.

Exposición y discusión de resultados. Actividades. Exposición y discusión de resultados.

Unidad II: Simulación de nanoestructuras magnéticas en OOMMF 2D y 3D

Herramientas de simulación micromagnética: uso del software Object Oriented MicroMagnetic Framework (OOMMF). Selección de parámetros. Descripción de los comandos. OOMMF y Micromagnetismo. Ejemplos 2D. Presentación de archivos de entrada (MIF). Rutas de acceso. Acceso a Nanohub. Ejemplos 3D. 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. Actividades. Exposición y discusión de resultados.

Unidad III: Principios Fundamentales de los skyrmions magnéticos: Estabilidad y Dinámica

Perspectiva general. Definiciones básicas: skyrmion magnético, carga topológica. Interacción de Dzyaloshinskii–Moriya. Diferencias entre skyrmions y burbujas magnéticas. Evidencia experimental de skyrmions a temperatura ambiente. Estabilidad y dinámica de skyrmions. Aplicaciones. Modelamiento de skyrmions en sistemas magnéticos utilizando la teoría micromagnética. Implementación de la interacción de Dzyaloshinskii–Moriya superficial. Estabilización de skyrmions. Dinámica inducida por la interacción con corrientes polarizadas en espín. Definición de problemas a resolver. Actividades. Exposición y discusión de resultados.

Unidad IV: Propiedades estáticas y dinámicas de nanoestructuras

Antecedentes teóricos. Aproximación al continuo. Fundamentos sobre resonancia magnética. Burbujas skyrmiónicas. Hopfions magnéticos. Nanohilos con diámetros modulados. Dinámica de la magnetización. Ejemplos. Actividades. Herramientas para el desarrollo de actividades empleando python. Exposición y discusión de resultados.

Unidad V: Materiales magnéticos quirales

Antecedentes generales de los materiales magnéticos quirales. Simulaciones micromagnéticas con Mumax3 en materiales quirales. Cálculos de configuraciones estacionarias y curvas de histéresis. Un nanohilo magnéticos con y sin modulación. Sistema de nanohilos magnéticos. Sistemas conectados tipo Artificial Spin Ice. Cálculos de la magnetorresistencia.

Seminario de actualización: Estudio experimental y por simulaciones micromagnéticas de nanodiscos para aplicaciones en tratamiento de cáncer.

PRÁCTICAS

Modalidad virtual: se entregará la resolución de las actividades asignadas por los docentes de cada módulo, enviando un archivo PDF que contendrá la resolución en formato de presentación póster- El contenido será expuesto y defendido al finalizar cada módulo.

BIBLIOGRAFÍA

Módulo 1

- [1.1] C. Kittel, Introduction to Solid State Physics, Seventh edition, Wiley India, New Delhi, India. (2009).
- [1.2] A. H. Morrish, The Physical Principles of Magnetism. (IEEE Press, New York, United States, 2001).
- [1.3] B. D. Cullity, C. D. Graham, Introduction to Magnetic Materials, Second Edition. IEEE Press and John Wiley & Sons, Inc., Publication. United States of America (2009). [61] Aharoni, A. (1996). Introduction to the Theory of Ferromagnetism International Series of Monographs on Physics. Oxford University Press Inc., New York.
- [1.4] O'Handley, R. C. (1999). Modern Magnetic Materials: Principles and Applications. Wiley-Interscience, New York. [64] M. J. Donahue, R. D. McMichael, Physica B: Condensed Matter 233, 272–278 (1997).
- [1.5] Artículos científicos y trabajos de grado (FAMAF) seleccionados por los docentes a cargo del módulo.

Módulo 2

- [2.1] J. E. Miltat, M. J. Donahue, M. J. Handbook of magnetism and advanced magnetic materials - Numerical micromagnetics: Finite difference methods. John Wiley & Sons, Universidad Estatal de Pensilvania (2007).
- [2.2] Software y manuales extraídos de <https://math.nist.gov/oommf/>
- [2.3] Artículos científicos seleccionados por los docentes a cargo del módulo.

Módulo 3

- [3.1] F. Tejo, E. Saavedra, J.C. Denardin, J. Escrig. Dynamic susceptibility of skyrmion clusters in Co/Pt nanodots. Applied Physics Letters 117 (15)
- [3.2] F. Tejo, et al. Stabilization of Magnetic Skyrmions on Arrays of Self-Assembled Hexagonal Nanodomes for Magnetic Recording Applications. ACS Applied Materials & Interfaces 12 (47), 52231-53570
- [3.3] F. Tejo, F. Velozo, R.G. Elías, J. Escrig. Oscillations of skyrmion clusters in Co/Pt multilayer nanodots. Scientific Reports 10 (16517)
- [3.4] N. Vidal-Silva, A. Riveros F. Tejo J. Escrig, D. Altbir. Controlling the nucleation and annihilation of skyrmions with magnetostatic interactions. Applied Physics Letters 115 (8).
- [3.5] F. Tejo, A. Riveros, J. Escrig, K.Y. Guslienko, O. Chubykalo-Fesenko. Distinct magnetic field dependence of Néel skyrmion sizes in ultrathin nanodots. Scientific reports 8 (1), 1-10
- [3.6] A. Fert, V. Cros, J. Sampaio. Skyrmions on the track. Nat. Nanotechnol. 8, 152–156 (2013).
- [3.7] J. Sampaio, V. Cros, S. Rohart, A. Thiaville, A. Fert. Nucleation, stability and current-induced motion of isolated magnetic skyrmions in nanostructures. Nat. Nanotechnol. 8, 839–844 (2013).
- [3.8] O. Boulle, et al. Room-temperature chiral magnetic skyrmions in ultrathin magnetic nanostructures. Nat. Nanotechnol. 11, 449–454 (2016)
- [3.9] C. Moreau-Luchaire, et al. Additive interfacial chiral interaction in multilayers for stabilization of small individual skyrmions at room temperature. Nat. Nanotechnol. 11, 444 (2016)
- [3.10] K. S. Ryu, S.-H. Yang, L. Tomas, S. S. P. Parkin. Chiral spin torque arising from proximity-induced magnetization. Nat. Commun. 5, 3910 (2014).
- [3.11] A. Fert, N. Reyren, V. Cros. Magnetic skyrmions: advances in physics and potential applications. Nature Reviews Materials volume 2, Article number: 17031 (2017).

Módulo 4

- [4.1] Investigation Of Static And Dynamic Magnetic Properties Of Two-Dimensional Magnonic Crystals, Thesis submitted for the degree of Doctor of Philosophy (Science) in Physics Ruma Mandal.
- [4.2] Quasistatic and ultrafast magnetization dynamics in magnetic nanostructures, Thesis submitted for the degree of Doctor of Philosophy (Science) in Physics (Experimental) by Bivas Rana
- [4.3] Investigation of static and dynamic magnetic properties in magnetic micro and nano elements with varying shapes, Thesis submitted for the degree of Doctor of Philosophy (Science) in Physics (Experimental) by Bipul Kumar Mahato
- [4.4] Collective Magnetization Dynamics in Magnetic Nanostructures at Various Length Scales and Time Scales, Thesis submitted for the degree of Doctor of Philosophy (Science) in Physics Susmita Saha
- [4.5] Susceptibilidad dinámica de nanoestructuras y geometrías complejas, Tesis para optar al grado de Doctor en Ciencia con Mención en Física, Eduardo Saavedra
- [4.6] Proposal of a micromagnetic standard problem for ferromagnetic resonance simulations, Journal of Magnetism and Magnetic Materials, Volume 421, 2017, Pages 428-439, ISSN 0304-8853, <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2016.08.009>.
- [4.7] Dynamic susceptibility of nanopillars, N. Dao et al 2004, Nanotechnology 15 S634
- [4.8] Magnetic normal modes of nanoelements, R.D. McMichael, M.D. Stiles, J. Appl. Phys. 97 (2005) 10J901.

Módulo 5

- [5.1] S.D. Yi, S. Onoda, N. Nagaosa, J. Hoon Han. Physical Review B 80, 054416 (2009).
- [5.2] J. H. Han, J. Zang, Z. Yang, J.-H. Park, N. Nagaosa. Physical Review B 82, 094429 (2010).
- [5.3] D. Prychynenko, M. Sitte, K. Litzius, B. Krüger, G. Bourianoff, M. Kläui, J. Sinova, K. Everschor-Sitte. Physical Review Applied 9, 014034 (2018).
- [5.4] G. Sáez, P. Díaz, E. Cisternas, E.E. Vogel, J. Escrig. Scientific Reports 11, 20811 (2021)
- [5.5] G. Sáez, E. Cisternas, P. Diaz, E.E. Vogel, J.P. Burr, E. Saavedra, J. Escrig. Journal of Magnetism and Magnetic Materials 512, 167045 (2020).
- [5.6] G. Sáez, P. Díaz, N. Vidal-Silva, J. Escrig, E. E. Vogel. Results in Physics 39, 105768 (2022).
- [5.7] E. Saavedra, J. Escrig, J.L. Palma. Journal of Magnetism and Magnetic Materials 490, 165522 (2019).
- [5.8] E. Saavedra, J. Escrig. Journal of Magnetism and Magnetic Materials 513, 167084 (2020).
- [5.9] F. Valdés-Bango, M. Vélez, L. M. Alvarez-Prado, J. I. Martín. New Journal of Physics 20, 113007 (2018).

MODALIDAD DE EVALUACIÓN

El/la estudiante presentará la resolución de actividades propuestas en cada módulo, en forma escrita y oral, y al finalizar, una actividad integradora asignada por los docentes.

REQUERIMIENTOS PARA EL CURSADO

Conocimientos básicos de magnetismo y materiales magnéticos, análisis matemático, manejo de herramientas interactivas de visualización de curvas (e.g. QtiPlot, Origin), planillas de cálculo, procesadores de texto y aplicaciones para presentaciones (Ej. Impress). Python.

TÍTULO: Sociofísica y econofísica			
AÑO: 2024	CUATRIMESTRE: 2°	N° DE CRÉDITOS: 1	VIGENCIA: 3 años
CARGA HORARIA: 20 horas de teoría y 4 horas de práctica			
CARRERA/S: Doctorado en Física			

FUNDAMENTOS

Dentro del área de Sistemas Complejos, la aplicación de técnicas y modelos de la Física Estadística a sistemas sociales se ha transformado en un tema de investigación actual, con un creciente interés dentro de la comunidad científica por su aplicación a problemas sociales concretos. En particular, dos áreas se han desarrollado en forma destacada: las aplicaciones a problemas de economía y finanzas, y las aplicaciones a fenómenos sociales, como la formación de opiniones, el análisis de las elecciones y la adopción de innovaciones y modas. El presente curso tratará de brindar una introducción a las áreas de sociofísica y econofísica, desde sus orígenes hasta aplicaciones actuales.

OBJETIVOS

Describir los problemas actuales en aplicaciones de la Física Estadística a fenómenos sociales y a la economía. Presentar y desarrollar los métodos matemáticos adecuados para la solución de estos problemas. Se espera que los alumnos se familiaricen con los modelos que se utilizan para explorar estos fenómenos sociales y económicos, y con algunas técnicas analíticas que permiten estudiar las propiedades dinámicas de los modelos.

Objetivos específicos:

- Estudio de la dinámica de formación de opiniones, de la propagación cultural, etc.
- Estudio de problemas económicos como la distribución de la riqueza y el origen de la moneda.
- Estudio de problemas financieros como la dinámica de mercados.

PROGRAMA

Unidad I: Introducción.

Conceptos generales.

Unidad II: Modelo de Ising.

Reseña histórica. Modelo de Ising en una dimensión. Modelo de Ising en dos dimensiones.

Unidad III: Modelo de segregación de Schelling.

Generalidades del modelo. Modelo de Schelling unidimensional. Variaciones del modelo lineal. Modelo de Schelling bidimensional.

Unidad IV: Modelo de propagación cultural de Axelrod.

Generalidades del modelo. Cultura. Dinámica. Regiones culturales. Zonas culturales. Resultados de simulaciones. Extensiones del modelo.

Unidad V: Modelos de confianza acotada.

Modelo de Hegselmann-Krausse. Modelo de Deffuant.

Unidad VI: Modelos basados en agentes.

Modelo del votante. Variantes del modelo del votante. Modelo de Sznajd. Modelo de la mayoría de Galam.

Unidad VII: Efecto de la propaganda.

Modelo del votante con propaganda constante. Resonancia estocástica. Propaganda oscilante y resonancia estocástica en modelos de Sznajd, del votante y de la mayoría.

Unidad VIII: Introducción a la econofísica.

Precusores de la econofísica: Newton, Pareto, Bachelier, Mandelbrot. Movimiento browniano. Langevin y el origen de las ecuaciones diferenciales estocásticas. Distribuciones de Levy. El "descubrimiento" de las leyes de potencias.

Unidad IX: Mercados de valores.

Funcionamiento del mercado de valores. Análisis de series temporales. Correlaciones. Hechos estilizados. Modelo de Pietronero. Opciones y mercados de futuro. Teoría de Black-Scholes.

Unidad X: Distribución de la riqueza.

Ley de Pareto. Coeficiente de Gini. Modelos para distribución de la riqueza y la segunda ley de la termodinámica. Concentración de la riqueza. Mecanismos de redistribución.

PRÁCTICAS

Los alumnos programarán uno de los modelos vistos en clase, en el lenguaje de programación de su preferencia. Se acordarán horarios de consulta extra para eso. Dichos programas, junto con un informe, serán evaluados para la calificación final del curso.

BIBLIOGRAFÍA

- Notas de Mecánica Estadística. Sergio Cannas.
- Thomas Schelling. Dynamics models of segregation. Journal of Mathematical Sociology. 1971, Vol. 1, pp 143-186.
- Axelrod, Robert. The dissemination of culture: A model with local convergence and global polarization. Journal of conflict resolution, 1997, vol. 41, no 2, p. 203-226.
- Rainer Hegselmann and Ulrich Krause. "Opinion dynamics and bounded confidence models, analysis, and simulation." Journal of artificial societies and social simulation 5.3 (2002).
- G. Deffuant, D. Neau, F. Amblard and G. Weisbuch. Mixing beliefs among interacting agents. Advances in Complex Systems, 3(01n04), 87-98 (2000).
- G. Deffuant, F. Amblard, G. Weisbuch, T. Faure, "How can extremism prevail? A study based on the relative agreement interaction model", J. Artif. Soc. Soc. Simulat. 5 (4) (2002).
- K. Sznajd-Weron and J. Sznajd, Opinion evolution in closed community, Int. J. Mod. Phys. C, 11 (2000) 1157 - 1165.
- D. Stauffer, A. O. Sousa and S. Moss de Oliveira, "Generalization to square lattice of Sznajd

sociophysics model”, *International Journal of Modern Physics C*, Vol. 11, No. 6 (2000) 1239-1245.

- Katarzyna Sznajd-Weron, Józef Sznajd. “Who is left, who is right?” *Physica A* 351 (2005) 593-604.

- Serge Galam, “Majority rule, hierarchical structures, and democratic totalitarianism: A statistical approach”, *Journal of Mathematical Psychology*, 30, 426-434 (1986).

- Serge Galam, “Social paradoxes of majority rule voting and renormalization group”. *Journal of Statistical Physics*, 61, 943-951 (1990).

- Serge Galam, “Application of statistical physics to politics”, *Physica A* 274 (1999) 132-139.

- Serge Galam, “Sociophysics: A review of Galam models”, *International Journal of modern physics C*, 19(03), 409-440 (2008).

- The mechanism of stochastic resonance, R. Benzi, S. Sutera, A. Vulpiani, *J. Phys. A* 14, L453 (1981).

- Stochastic aspects of climatic transitions—additive fluctuations. C. Nicolis, G. Nicolis, *Tellus* 33, 225 (1981)

- Stochastic resonance, L. Gammaitoni, P. Hänggi, P. Jung, F. Marchesoni, *Reviews of modern physics* 70, 223 (1998)

- Stochastic resonance: a remarkable idea that changed our perception of noise, L. Gammaitoni, P. Hänggi, P. Jung, F. Marchesoni, *Eur. Phys. J. B* 69, 1 (2009)

- Opinion evolution in the presence of constant propaganda: homogeneous and localized cases. M. Cecilia Gimenez, Luis Reinaudi, Ana Pamela Paz-García, Paulo M. Centres and Antonio J. Ramirez-Pastor. *Eur. Phys. J. B* 94, 35 (2021).

- Interplay between social debate and propaganda in an opinion formation model, M. C. Gimenez, J. A. Revelli, M. S. de la Lama, J. M. Lopez, and H. S. Wio, *Physica A* 392 (2013) 278–286.

- Non Local Effects in the Sznajd Model: Stochastic resonance aspects, M. Cecilia Gimenez, J. A. Revelli and H. S. Wio, *ICST Transactions on Complex Systems*, October-December 2012, Volume 12, Issue 10-12, e3.

- Contrarian Voter Model under the influence of an Oscillating Propaganda: Consensus, Bimodal behavior and Stochastic Resonance. M. Cecilia Gimenez*, Luis Reinaudi and Federico Vazquez. *Entropy* (2022), 24, 1140.

- Contrarian Majority Rule Model with External Oscillating Propaganda and Individual Inertias. M. Cecilia Gimenez, Luis Reinaudi, Serge Galam and Federico Vazquez. *Entropy* (2023), 25, 1402.

- An Introduction to Econophysics: Correlations and Complexity in Finances; Rosario Mantegna and H. Eugene Stanley
- Dynamics of Markets. Econophysics and Finance. Joseph L. McCauley
- Patterns of Speculation, B.M. Roehner
- Why Stocks Markets Crash, D. Sornette.
- Stochastic processes in physics and chemistry. N.G. van Kampen.
- Statistical mechanics: Entropy, order parameters and complexity. J.P. Sethna
- How Nature Works, Per Bak
- Self Organized Criticality, Henrik Jeldtoft Jensen
- The Mathematics of Financial Derivatives; Paul Wilmott, Sam Howison and Jeff Dewynne
- Theory of Financial Risks; Jean-Philippe Bouchaud and Mark Potters
- Castellano, Claudio, Santo Fortunato, and Vittorio Loreto. "Statistical physics of social dynamics."Reviews of modern physics 81.2 (2009): 591.

MODALIDAD DE EVALUACIÓN

Regularidad: Asistencia al 70% de las clases.

Aprobación: Programación de uno de los modelos vistos en clase, con presentación de informe y defensa.

REQUERIMIENTOS PARA EL CURSADO

Conocimientos básicos de matemática y de física. Manejo de algún lenguaje de programación.

TÍTULO: Teoría del funcional de la densidad y cálculos ab initio			
AÑO: 2024	CUATRIMESTRE: 2°	N° DE CRÉDITOS: 3	VIGENCIA: 3 años
CARGA HORARIA: 60 horas de teoría y 60 horas de práctica			
CARRERA/S: Doctorado en Física			

FUNDAMENTOS

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.

La resolución directa de la ecuación de Schrödinger proporciona una descripción precisa del comportamiento de sistemas cuánticos muy pequeños, como átomos simples o moléculas pequeñas. Sin embargo, a medida que aumenta la complejidad del sistema, las ecuaciones resultantes se vuelven cada vez más difíciles de resolver, tanto numérica como analíticamente. Esto se debe a que el número de partículas involucradas y las interacciones entre ellas aumentan significativamente, lo que conduce a ecuaciones altamente complejas que requieren recursos computacionales considerablemente grandes para su resolución. Por lo tanto la aplicabilidad práctica de la ecuación de Schrödinger se ve limitada en sistemas más grandes y complejos. Es aquí donde métodos alternativos como la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) se vuelven especialmente útiles, ya que ofrecen una forma más eficiente de abordar problemas de estructura electrónica de sistemas más grandes.

La DFT reformula el problema para ser capaz de obtener, por ejemplo, la energía y la distribución o densidad electrónica del estado fundamental, trabajando con el funcional de la densidad electrónica en lugar de hacerlo con la función de ondas. Una ventaja es que la densidad es una magnitud más simple que la función de ondas y por lo tanto más fácil de calcular. Y en la práctica son accesibles sistemas mucho más complejos: la función de ondas de un sistema de N electrones depende de $3N$ variables, mientras que la densidad electrónica solo depende de 3 variables. Originalmente, la DFT se desarrolló en el marco de la teoría cuántica no relativista (ecuación de Schrödinger independiente del tiempo) y de la aproximación de Born-Oppenheimer.

El tipo más común de cálculo ab initio es llamado cálculo Hartree Fock (HF), en el cual la aproximación principal es llamada aproximación de campo central. Un método ab initio alternativo es la DFT. En este tipo de cálculos, hay un Hamiltoniano aproximado y una expresión aproximada de la densidad electrónica total. El aspecto favorable de los métodos

ab initio es que eventualmente convergen en la solución exacta, una vez que todas las aproximaciones se han hecho suficientemente pequeñas en magnitud.

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

Originalmente, la DFT se desarrolló en el marco de la teoría cuántica no relativista (ecuación de Schrödinger independiente del tiempo) y de la aproximación de Born-Oppenheimer. La teoría fue extendida posteriormente al dominio de la mecánica cuántica dependiente del tiempo, y se habla de la TD-DFT o Teoría del Funcional de la Densidad Dependiente del Tiempo y del dominio relativista. Entre otras cosas, esto permite calcular estados excitados y obtener la densidad de estados electrónicos vinculados con espectros de emisión y absorción. La teoría de perturbaciones de muchos cuerpos (MBPT) ofrece herramientas poderosas como el formalismo de la ecuación de Bethe-Salpeter (BSE) que fue introducido por primera vez en 1951 para calcular estados ligados de dos partículas. En el contexto de la absorción óptica, el formalismo de la BSE se utiliza para describir excitaciones de pares electrón-hueco. De particular interés son los pares electrón-hueco ligados con energías por debajo del band gap, que son cuasi-partículas conocidas como excitones. La BSE puede formularse como un problema de auto valores de un Hamiltoniano relativista efectivo de dos partículas.

Dado que la BSE describe pares electrón-hueco interactuantes, es natural introducir una base de dos partículas que refleje la excitación (términos resonantes) y la desexcitación (términos anti-resonantes) de pares electrón-hueco independientes

La teoría fue extendida al dominio de la mecánica cuántica dependiente del tiempo, y se habla de la TD-DFT o Teoría del Funcional de la Densidad Dependiente del Tiempo y del dominio relativista. Entre otras cosas, esto permite calcular estados excitados y obtener la densidad de estados electrónicos vinculados con espectros de emisión y absorción.

OBJETIVOS

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

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

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

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

PROGRAMA

Unidad I: Título de la Unidad I: Hamiltoniano cuántico DFT

Hamiltoniano cuántico mediante el cual se resuelve el 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 II: Título de la Unidad II: Fundamentación de la Teoría del Funcional de la Densidad.

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

Unidad III: Título de la Unidad III: Resolución del problema mediante la autoconsistencia.

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 IV: Título de la Unidad IV: 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 V: Título de la Unidad V: Quantum Espresso

Presentación de una suite integrada de códigos informáticos de código abierto para cálculos

de estructura electrónica y modelado de materiales a escala nanométrica. Está basada en la teoría del funcional de la densidad, ondas planas y pseudopotenciales. Se analizan ejemplos de archivos de entrada para distintos sistemas y diferentes postprocessing. Ejemplos de Nudget Elastic Bands (NEB).

Unidad VI: Otros programas de cálculo

Presentación de los Softwares Exciting y ORCA. Cálculo autoconsistente. Se analizan algunos casos, periódicos para exciting y moléculas para ORCA. Se analizan los inputs y puntos a considerar para realizar los cálculos. Cálculos de densidad de estados, estructura de bandas, densidad electrónica de carga, dinámica molecular.

PRÁCTICAS

Desarrollo y aplicación de programas de cálculos, en el aula supervisados por el docente. Culminación de los mismo 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 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 Print ISBN:9780470373170 |Online ISBN:9780470447710 |DOI:10.1002/9780470447710. 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
5. Developer's Manual for Quantum ESPRESSO (v.6.4.1). <http://www.quantum-espresso.org/resources/developers-manual>.
6. ORCA Manual. https://cec.mpg.de/fileadmin/media/Forschung/ORCA/orca_manual_4_0_1.pdf
7. Exciting manual. <https://exciting-code.org/home/about/tutorials>

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 integrador.

REQUERIMIENTOS PARA EL CURSADO

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