

Título del curso: Simulación computacional de materiales

OBJETIVO(S) GENERAL(ES) DE LA ASIGNATURA (4)

Se presentan las bases de los métodos de cálculo para estudiar las propiedades electrónicas de materiales nanoestructurados, superficies y sólidos. Sentar las bases de programación para modelar casos simples y posteriormente aprender a utilizar paquetes de cálculo basados en la teoría del funcional de la densidad para modelar sistemas de interés científico y tecnológico. Este curso servirá para que los alumnos puedan complementar sus estudios de investigación con cálculos de primeros principios para determinar la respuesta óptica y las propiedades electrónicas de los materiales.

TEMAS Y SUBTEMAS (5) (28 SESIONES. 1.5 HORAS CADA SESIÓN)

1. Fundamentos de física del estado sólido.
 - 1.1 Redes simples y compuestas
 - 1.2 Celdas de Wigner-Seitz
 - 1.3 Redes Recíprocas
 - 1.4 Zona de Brillouin
 - 1.5 Densidad de estados y puntos críticos
2. Fundamentos de mecánica cuántica.
 - 2.1 La ecuación de Schrödinger
 - 2.2 El principio variacional
 - 2.3 La aproximación de Hartree-Fock
 - 2.4 Energía de correlación
 - 2.5 Densidad electrónica
 - 2.6 Matrices de densidad
 - 2.7 Descripción de estados cuánticos y notación de Dirac
 - 2.8 Operadores de densidad
3. Teoría del funcional de la densidad
 - 3.1 Teorema de Hohenberg-Kohn
 - 3.2 Ecuaciones de Kohn-Sham
 - 3.3 Aproximación de la densidad local
4. Cálculos prácticos DFT
 - 4.1 Átomos
 - 4.2 Moléculas
 - 4.3 Sistemas extendidos: celdas unitarias y superceldas
 - 4.4 Cristales simples
 - 4.4.1 Cálculos autoconsistentes
 - 4.4.2 Cálculo de la densidad de estados
 - 4.4.3 Cálculo de estructura de bandas
 - 4.4.4 Propiedades ópticas y respuesta dieléctrica
 - 4.5 Superficies
5. Perspectivas y temas abiertos de investigación
 - 5.1 Propiedades electrónicas y ópticas de nanoestructuras
 - 5.2 Almacenamiento de energía
 - 5.3 Reactividad y propiedades catalíticas

5.4 Coordenadas de reacción y diagramas de energía libre

ACTIVIDADES DE APRENDIZAJE (6)

i) Frente a docente: Se llevarán a cabo un total de 28 sesiones. Los primeros 3 capítulos del curso se llevarán a cabo frente a pizarrón y mediante el uso de proyector. Se realizarán ejercicios por parte del profesor y los estudiantes tanto teóricos como prácticos mediante computadora portátil. Se llevarán a cabo de 2 a 3 exámenes parciales y una exposición final de un protocolo de investigación.

ii) Independientes: El estudiante estará realizando actividades independientes de programación, cálculos computacionales de manera remota, resolución de problemas de tarea, lectura de artículos de investigación y revisión de la literatura.

CRITERIOS Y PROCEDIMIENTOS DE EVALUACION Y ACREDITACION (7)

Se tomarán en cuenta los ejercicios de tarea, exámenes parciales, protocolo de investigación y aptitudes.

BIBLIOGRAFÍA (8)

- Solid State Physics, G. Pastori Parravicini and G. Grosso, Academic Press, 2000.
- Density Functional Theory of Atoms and Molecules, R. Parr and W. Yang. 1989, Oxford.
- Molecular Quantum Mechanics, P. Atkins and R. Friedman, Oxford U Press, 2011.
- Introduction to Solid State Physics., Kittel, 6th Edition.
- Quantum Physics, Gasiorowicz., 3rd Ed U Minnessota.
- Modern Quantum Mechanics, JJ Sakurai, Cambridge, U Press.
- Modern Quantum Chemistry, A. Szabo and N.S. Ostlund.
- Bonding and structure of molecules and solids, D. Pettifor. Oxford.

Elaborado por **Peter L Rodríguez Kessler**

Contacto: plkessler@cio.mx