

DOCTORADO EN CIENCIA DE MATERIALES

CURSO OPTATIVO

Periodo: Otoño (5 agosto – 13 diciembre 2024)

Dr. Omar De la Peña Seaman

Instituto de Física (IFUAP)

Benemérita Universidad Autónoma de Puebla (BUAP)

QUÍMICA CUÁNTICA DE SÓLIDOS

Objetivo

Aprender los fundamentos teóricos de los métodos de cálculo de las propiedades electrónicas de los sistemas cristalinos, así como también la aplicación de algunos de los principales códigos computacionales que llevan a cabo tales procedimientos.

Contenido

- 1. Fundamentos:** Principio variacional y multiplicadores de Lagrange. Teoría perturbativa. La ecuación de Schrödinger. La aproximación de Born-Oppenheimer. Sistema de unidades atómicas.
- 2. El método de Hartree-Fock:** La aproximación de Hartree. El método de Hartree-Fock. Orbitales, energía total, teorema de Koopmans. Método de Hartree-Fock-Roothaan.
- 3. Bases de expansión:** Orbitales localizados: Slater y Gaussianos. Ondas planas. Funciones aumentadas. Funciones aumentadas y linealizadas.
- 4. Teoría del funcional de la densidad (DFT):** Aproximación de Thomas-Fermi. Teoremas de Hohenberg-Kohn. Método de Kohn-Sham. Energía de intercambio y correlación: aproximaciones locales y semi-locales. Pseudopotenciales.
- 5. Cálculo de estructura electrónica y funciones de respuesta:**
 - *Estructura electrónica:* Estructura de bandas en una y tres dimensiones, formulación de Bloch y momento del cristal, densidad de estados.
 - *Fuerzas:* Teorema de Hellmann-Feynmann, optimización estructural.
 - *Vibraciones:* Dinámica de red, fonones, teoría de respuesta lineal.
 - *Efectos relativistas:* Ecuación de Dirac, ecuación de Schrödinger.

Impartición del curso

Sesiones impartidas por el profesor y participación de los estudiantes en resolución de problemas y exposición de temas actuales relacionados con la asignatura.

Formas de evaluación

Tareas al final de cada tema y exposición de tópicos relacionados con el curso.

Bibliografía

1. M. Springborg, *Methods of Electronic-Structure Calculations: From Molecules to Solids*, 1st. edition (John Wiley & Sons, England, 2000).
2. R.M. Martin, *Electronic Structure: Theory and Practical Methods*, 1st edition (Cambridge Univ. Press, 2004).
3. W. Koch, M.C. Holthausen, *A Chemist's Guide to Density Functional Theory*, 2nd. edition (Wiley-VCH Verlag 2001).
4. D.S. Sholl, J.A. Steckel, *Density Functional Theory: A Practical Introduction*, 2nd. edition (John Wiley & Sons, 2009).

Fuente de consulta e información

Todas las sesiones de clase así como también las tareas serán publicadas on-line al término de cada tema en el siguiente link:

http://www.ifuap.buap.mx/~oseaman/quantum_chemsol_2024.html