

Universidad de La Habana
Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales

Curso de Postgrado: Métodos de cálculo de la estructura electrónica en materiales	Total de Horas 144 Créditos 3	Tipo de curso: Básico <input type="checkbox"/> Específico <input checked="" type="checkbox"/> Carácter: Obligatorio <input type="checkbox"/> Opcional <input checked="" type="checkbox"/>
Profesor Dr. Karell Valdiviés Cruz		
Objetivo general <ul style="list-style-type: none"> Estudiar los fundamentos de los métodos de cálculo de la estructura electrónica en materiales. 		
Contenidos <p>Enlace químico. Ecuación de Schrödinger. Aproximaciones. Hipersuperficie de energía potencial.</p> <p>Tema 1: Simetría y estructura electrónica de sistemas moleculares y materiales.</p> <p>Simetría molecular. Teoría de grupos. Teoría de representaciones. Simetría cristalina. Espacios real y recíproco. Defectos. Tratamiento mecánico-cuántico de la estructura electrónica de moléculas poliatómicas. Método de Orbitales Moleculares de Hückel. Análisis de población. Tratamiento mecánico-cuántico de la estructura electrónica de materiales. Teorema de Bloch. Densidad de estados. Estructura de bandas de energía.</p> <p>Tema 2: Métodos de cálculo de la estructura electrónica.</p> <p>Método de Hartree-Fock. Sistemas de capa abierta. Sistemas periódicos. Funciones de base. Potenciales atómicos en sólidos. Correlación electrónica. Métodos post-Hartree Fock. Métodos semiempíricos. Densidad electrónica. Huecos de intercambio-correlación. Teoría de los Funcionales de la Densidad. Derivadas de la energía potencial. Teorema de Hellmann-Feynman. Cálculo de fuerzas. Cálculo de propiedades mecánicas, eléctricas y magnéticas. Fonones. Método de Car Parrinello. Cálculo de propiedades termodinámicas. Costo vs. eficiencia computacional. Complejidad algorítmica. Análisis de la convergencia de los esquemas autoconsistentes.</p> <p>Tema 3: Aplicaciones de los métodos de cálculo de la estructura electrónica en la Ciencia de Materiales.</p> <p>Reacciones químicas. Teoría de los Orbitales Frontera. Principio de los Ácidos y Bases Duros y Blandos. Teoría de los Funcionales de la Densidad Conceptual. Superficies. Morfología. Defectos. Transiciones de fase. Nucleación y crecimiento. Conductividad eléctrica. Superficies de Fermi. Superconductividad. Efecto Jahn-Teller. Distorsiones de Peierls. Cálculo de bandas de energía.</p>		
Objetivos específicos <ul style="list-style-type: none"> Profundizar en los fundamentos del enlace químico en sistemas poliatómicos en términos de la Mecánica Cuántica. Emplear la Teoría de Grupos y la Teoría de las Representaciones para estudiar la simetría molecular y cristalina, así como extender su aplicación a la descripción mecánico-cuántico del enlace químico. Explicar el formalismo mecánico-cuántico de los métodos de la estructura electrónica en sistemas poliatómicos, particularmente aquellos basados en los métodos de Hartree-Fock, post-Hartree Fock, semiempíricos, la Teoría del Funcional de la Densidad, así como el Método de Car Parrinello. Analizar aspectos relacionados con los cálculos de la estructura electrónica en sistemas poliatómicos, tales como las funciones de base, los potenciales atómicos, el cálculo de las derivadas de la energía potencial, el cálculo de las propiedades termodinámicas, la complejidad algorítmica y el análisis de la convergencia de los esquemas autoconsistentes. 		

- Abordar las metodologías computacionales más empleadas para estudiar las propiedades físicas y químicas de los materiales, así como determinados fenómenos típicos de la Ciencia de Materiales, tales como reacciones químicas, superficies, defectos, morfología, transiciones de fase, crecimiento cristalino, propiedades mecánicas, fonones, conductividad eléctrica, superconductividad, efecto Jahn Teller, distorsiones de Peierls, propiedades eléctricas y magnéticas.

Bibliografía fundamental

1. Levine, Ira N.; *Química Cuántica*, PEARSON EDUCACIÓN, S. A., 5ª Ed., 2001.
2. Atkins, P. W., Friedman, R. S.; *Molecular Quantum Mechanics*, 3rd Ed., Oxford University Press, 1997.
3. Hargittai, M., Hargittai, I.; *Symmetry through the eyes of a chemist*, 3rd Ed., Springer, 2009.
4. Altmann, Simon L.; *Band theory of solids: an introduction from the point of view of symmetry*, Oxford University Press, New York, 1991.
5. Atkins, P. W., Overton, T. L., Rourke, J. P., Weller, M. T., Armstrong, F. A.; *Inorganic Chemistry*, W. H. Freeman and Company New York, 5th Ed., 2010.
6. Magnasco, V.; *Models for bonding in Chemistry*, John Wiley & Sons, United Kingdom, 2010.
7. Canadell, E., Doublet, M. L., Jung, Ch.; *Orbital Approach to the Electronic Structures of Solids*, Oxford University Press., 2012.
8. Jensen, F.; *Introduction to Computational Chemistry*, 2nd Ed.; John Wiley & Sons, England, 2007.
9. Szabo, A., Ostlund, N. S.; *Modern Quantum Chemistry*, Dover Publications Inc., Mineola, New York, 1989.
10. Cramer, C. J.; *Essentials of Computational Chemistry*, 2nd Ed.; John Wiley & Sons, England, 2004.
11. Dronskowski, R.; *Computational Chemistry of Solid Materials*, Wiley VCH, Weinheim, 2005.
12. Leach, R. A.; *Molecular Modelling*, 2nd Ed.; Edimburg Gate, England, 2001.
13. Koch, W., Holthausen, M. C. A.; *Chemist's Guide to Density Functional Theory*, Wiley, 2001.
14. Parr R., Yang W.; *Density functional theory of atoms and molecules*, Oxford University Press Inc, New York, 1989.
15. Kohanoff J.; *Electronic structures calculations for solids and molecules*, Cambridge University Press, 2006.
16. Kantorovich, L.; *Quantum Theory of the Solid State: an introduction*, Springer Science + Bussines Media Dordrecht, 2004.
17. Fleming, I.; *Molecular Orbitals and Organic Chemical Reactions*, John Wiley & Sons, United Kingdom, 2010.
18. Mullin, J. W.; *Cristallization*, 2nd Ed., Butterworth-Heinemann, Oxford, 2001.
19. Albright, T. A., Burdett, J. K., Whangbo, M.; *Orbital interactions in Chemistry*, 2nd Ed., John Wiley & Sons Inc., Hoboken, New Jersey, 2013.

Sistema de evaluación

Examen final.

Formas de enseñanza

- Conferencias.
- Clases prácticas.