

17-18

MÁSTER UNIVERSITARIO EN FÍSICA DE
SISTEMAS COMPLEJOS

GUÍA DE ESTUDIO PÚBLICA



FUNCIONAL DE LA DENSIDAD: SISTEMAS ELECTRÓNICOS

CÓDIGO 21156153



Ámbito: GUJ - La autenticidad, validez e integridad de este documento puede ser verificada mediante el "Código Seguro de Verificación (CSV)" en la dirección <https://sede.uned.es/valida/>



6D67417CF9655B3D82AAACEA70A0573

ÍNDICE

PRESENTACIÓN Y CONTEXTUALIZACIÓN	
REQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES PARA CURSAR ESTA ASIGNATURA	
EQUIPO DOCENTE	
HORARIO DE ATENCIÓN AL ESTUDIANTE	
COMPETENCIAS QUE ADQUIERE EL ESTUDIANTE	
RESULTADOS DE APRENDIZAJE	
CONTENIDOS	
METODOLOGÍA	
SISTEMA DE EVALUACIÓN	
BIBLIOGRAFÍA BÁSICA	
BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA	
RECURSOS DE APOYO Y WEBGRAFÍA	



Nombre de la asignatura	FUNCIONAL DE LA DENSIDAD: SISTEMAS ELECTRÓNICOS
Código	21156153
Curso académico	2017/2018
Títulos en que se imparte	MÁSTER UNIVERSITARIO EN FÍSICA DE SISTEMAS COMPLEJOS
Tipo	CONTENIDOS
Nº ETCS	6
Horas	150.0
Periodo	SEMESTRE 1
Idiomas en que se imparte	CASTELLANO

PRESENTACIÓN Y CONTEXTUALIZACIÓN

La asignatura “Funcionales de la densidad: Sistemas electrónicos” aborda la descripción de sistemas formados por muchos electrones, presentando algunos de los métodos de cálculo más habituales de sus propiedades estáticas y dinámicas (interacción con campos externos). Se prestará especial atención a la denominada “Teoría del funcional de la densidad”, que es actualmente el método más extendido para predecir teóricamente las propiedades de sistemas físicos muy variados, desde las moléculas (tanto las más sencillas como las complicadas estructuras de las macromoléculas) hasta los sólidos, pasando por el estudio de nanosistemas o de sistemas mesoscópicos.

La asignatura es de interés para todos aquellos estudiantes que vayan a enfocar su actividad futura en cálculos dentro de las áreas de Física de la Materia Condensada, Física de Materiales, Nanociencia, Química-Física, etc. También es de utilidad para futuros profesionales en el desarrollo teórico de nuevas tecnologías en Física, Química, Farmacología,... Por otra parte, puede sentar las bases del conocimiento de algoritmos y procedimientos que se usan de manera rutinaria en programas de cálculo o simulación numérica avanzados, tanto en materiales ordinarios como en nuevos materiales.

La asignatura es optativa, impartándose en el primer cuatrimestre del Máster, y consta de 6 ECTS, equivalentes a 150 horas de trabajo. El enfoque de la asignatura es fundamentalmente práctico, de manera que, a título orientativo, dichas horas de trabajo se distribuyen de la siguiente manera:

- Trabajo autónomo de los contenidos teóricos (lectura y consulta de los materiales didácticos; estudio crítico de los mismos; realización de los ejercicios de autoevaluación): 50%
- Realización de las actividades prácticas y elaboración de los informes de resultados: 50%.

REQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES PARA CURSAR ESTA ASIGNATURA

Para abordar la asignatura con garantías de éxito son precisos conocimientos avanzados en Física y Matemáticas, que hayan sido adquiridos en asignaturas de grados o licenciaturas en Ciencias o Ingeniería. En particular:

- 1.- Álgebra lineal y Análisis matemático (al nivel de estudios de algunos grados en ingeniería o ciencias).
- 2.- Mecánica, Óptica y Electromagnetismo (al mismo nivel que el anterior).



3.- **Mecánica cuántica** (función de onda, ecuación de Schrödinger, interpretación probabilística).

4.- **Física del estado sólido** (estructura cristalina y propiedades básicas, teoría de bandas, ...).

En general, los conocimientos adquiridos en grados o licenciaturas en Ciencias Físicas o Químicas deberían ser suficientes. Para aquellos estudiantes provenientes de otras disciplinas, el material complementario incluirá orientaciones para el estudio de los conocimientos previos correspondientes a los dos últimos puntos antes citados.

El estudiante ha de estar bien familiarizado con el uso de ordenadores, ya que buena parte del trabajo de la asignatura está orientado a la ejecución de programas de cálculo (si bien estos programas se aportan por el equipo docente).

EQUIPO DOCENTE

Nombre y Apellidos
Correo Electrónico
Teléfono
Facultad
Departamento

JOSE ENRIQUE ALVARELLOS BERMEJO
jealvar@fisfun.uned.es
91398-7120
FACULTAD DE CIENCIAS
FÍSICA FUNDAMENTAL

Nombre y Apellidos
Correo Electrónico
Teléfono
Facultad
Departamento

DAVID GARCIA ALDEA
dgaldea@fisfun.uned.es
91398-7636
FACULTAD DE CIENCIAS
FÍSICA FUNDAMENTAL

HORARIO DE ATENCIÓN AL ESTUDIANTE

El medio básico de comunicación y tutorización entre estudiantes y equipo docente son las herramientas de comunicación del Curso virtual, especialmente los Foros de debate.

Además, podrán utilizarse el correo electrónico, el teléfono y la entrevista personal.

Nota importante: el equipo docente puede cambiar con posterioridad a la redacción de esta información. En todo caso, los profesores que constan en el apartado "*Equipo docente*" están actualizados.

Profesor: J. E. Alvarelllos

E-mail: jealvar@fisfun.uned.es

Teléfono: 91 398 7120

Horario: Miércoles, de 12 a 14h y de 16 a 18h

Despacho: 207 - Facultad de Ciencias

Profesor: David García Aldea

E-mail: dgaldea@fisfun.uned.es

Teléfono: 91 398 7142

Horario: Martes, de 16 a 20 h

Despacho: 206 - Facultad de Ciencias



COMPETENCIAS QUE ADQUIERE EL ESTUDIANTE

RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Objetivos:

- Comprensión de la complejidad intrínseca de la correlación electrónica en sistemas cuánticos de muchos cuerpos.
- Saber relacionar las propiedades electrónicas y la estructura de los materiales.
- Analizar los procesos básicos de excitación electrónica a escala atómica y nanométrica.
- Conocer algunas de las técnicas de resolución de la ecuación de Schrödinger para un sistemas de muchas partículas y su fundamento teórico.
- Capacidad para saber cómo elegir el método de cálculo más adecuado para el estudio de un problema concreto de propiedades electrónicas.

Destrezas:

- Habilidad en el manejo de códigos numéricos avanzados para el cálculo de propiedades electrónicas.
- Ser capaz de relacionar propiedades electrónicas calculadas teóricamente con magnitudes físicas medibles experimentalmente.
- Solvencia en el tratamiento de datos y en su análisis crítico.
- Experiencia en la consulta de documentación técnica de software de simulación avanzado y en la búsqueda de fuentes de información y bibliográficas relevantes para ejecutar un proyecto.
- Capacidad de escritura de una memoria científica, que aúne las destrezas mencionadas.

Actitudes:

- Análisis crítico de resultados.
- Exposición razonada de los resultados de un trabajo o proyecto de investigación.
- Capacidad de elección de las herramientas y de la estrategia adecuadas para abordar un proyecto concreto.

CONTENIDOS

METODOLOGÍA

La metodología de la asignatura está basada en la enseñanza a distancia, a través del curso virtual implementado en la “plataforma aLF” dentro de la web de la UNED. Dentro de este curso virtual, los estudiantes dispondrán de:

- 1.- La información general de la asignatura, donde se establece el orden temporal de actividades y prácticas.
- 2.- Material didáctico específico (teórico y práctico) de la asignatura.



3.- Enlaces a los recursos informáticos necesarios para la realización de las Tareas prácticas, así como la explicación de lo que se pide en las mismas.

4.- Enlaces a material bibliográfico complementario.

5.- Herramientas de comunicación: foros de debate, correo electrónico y plataforma de entrega de los informes de las Tareas prácticas.

Siguiendo el esquema temporal de la asignatura, el estudiante abordará el estudio autónomo de los contenidos teóricos de cada uno de los cuatro temas a partir de material didáctico redactado específicamente. Este estudio se complementará con lecturas más específicas señaladas en el propio material.

El curso se completa con la realización a lo largo del mismo de cinco Tareas prácticas, en las que se usan herramientas informáticas, tanto en su realización de los cálculos como en la escritura de las memorias. En estos trabajos prácticos se aplicarán los conocimientos teóricos adquiridos a sistemas físicos específicos.

SISTEMA DE EVALUACIÓN

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

Los contenidos teóricos de la asignatura se presentan directamente en el curso virtual.

El estudiante puede profundizar en dichos contenidos teóricos acudiendo a los tres libros siguientes:

•**Varios autores: *A Primer in Density Functional Theory***, Lectures Notes in Physics (Springer, 2003, ISBN:978-3540030836).

Un texto realizado por investigadores de prestigio en el campo y basado en una *Escuela de verano*. Cubre buena parte del curso.

•**R. Parr and W. Yang: *Density Functional Theory of Atoms and Molecules*** (Oxford University Press, 1989, ISBN:978-0195092769).

Esta obra es especialmente útil para los dos primeros temas del curso. Al ser un texto de hace veinte años, no contiene información actualizada, pero los fundamentos están expuestos de forma clara y rigurosa a la vez.

•**Varios autores: *Time Dependent Density Functional Theory***, Lectures Notes in Physics (Springer, 2006, ISBN: 978-3540354222).

De interés para los temas 3 y 4. Algunos capítulos tienen un nivel elevado, pero el texto ofrece una perspectiva actual y rigurosa de los fundamentos y aplicaciones de la teoría del funcional de la densidad dependiente del tiempo.



BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

El material bibliográfico básico se podrá complementar con la lectura de artículos científicos de interés para la realización de los trabajos prácticos.

RECURSOS DE APOYO Y WEBGRAFÍA

Todos los recursos de apoyo al estudio están contenidos en la plataforma virtual.

El estudiante ha de prestar particular atención a:

- 1.- Los contenidos teóricos básicos
- 2.- Guiones de los trabajos prácticos
- 3.- Enlaces a los artículos que constituyen la bibliografía complementaria.

IGUALDAD DE GÉNERO

En coherencia con el valor asumido de la igualdad de género, todas las denominaciones que en esta Guía hacen referencia a órganos de gobierno unipersonales, de representación, o miembros de la comunidad universitaria y se efectúan en género masculino, cuando no hayan sido sustituido por términos genéricos, se entenderán hechas indistintamente en género femenino o masculino, según el sexo del titular que los desempeñe.

