ASIGNATURA DE MÁSTER:

FUNCIONAL DE LA DENSIDAD: SISTEMAS ELECTRÓNICOS

Curso 2011/2012

(Código:21156153)

1.PRESENTACIÓN

La asignatura "Funcionales de la densidad: Sistemas electrónicos" aborda de manera fundamentalmente práctica la descripción de sistemas formados por muchos electrones, presentando algunos métodos de cálculo 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 estos sistemas.

La asignatura es de interés para todos aquellos estudiantes que vayan a enfocar su actividad futura a la investigación en Química-Física, Física de Materiales o Nanociencia. También es de utilidad para futuros profesionales en el desarrollo de nuevas tecnologías, sin olvidar a aquellos que vayan a usar de manera rutinaria programas de cálculo o simulación numérica avanzados, tanto en materiales ordinarios como en nuevos materiales.

La asignatura es optativa, impartiéndose en el primer cuatrimestre del Máster, y consta de 6 ECTS, equivalentes a 150 horas de trabajo. A título orientativo, dichas horas de trabajo se distribuyen de la siguiente manera:

- Trabajo con contenido teórico (lectura y consulta de los materiales didácticos): 20%
- Trabajo autónomo (estudio de los contenidos teóricos y realización de los ejercicios de autoevaluación): 40%
- Realización de las actividades prácticas y elaboración de los informes de resultados: 40%.

2.CONTEXTUALIZACIÓN

Dentro del presente Máster, esta asignatura proporciona conocimientos y herramientas básicos para abordar el estudio de las técnicas de cálculo de *primeros principios* que actualmente más se usan en la evaluación de propiedades electrónicas de sistemas cuánticos de muchas partículas (tanto en campos cercanos a la Materia Condensada como los cercanos a la Química Cuántica).

La asignatura pertenece al Módulo "Física estadística de sistemas complejos" y sus contenidos preceden y preparan a los de las asignaturas "Procesos microscópicos en materia condensada" (más descriptiva) y "Teoría cuántica de muchas partículas" (más formal), ambas dentro del segundo cuatrimestre.

3.REQUISITOS PREVIOS RECOMENDABLES

Para abordar la asignatura con garantías de éxito son precisos conocimientos en Matemáticas y Física adquiridos en asignaturas de grado/licenciatura. En particular:

1. Álgebra lineal y Análisis matemático (al nivel de estudios de grado en ingeniería o ciencias).
2. Física general: Mecánica, Óptica y Electromagnetismo (al mismo nivel que el anterior).
3. Mecánica cuántica básica (función de onda, ecuación de Schrödinger, interpretación probabilística).
4. Fundamentos de Física del estado sólido (estructura cristalina, funciones de Bloch, teoría de bandas).

Ámbito: GUI - 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/
23B05CD2EA54FECAF502B6C43F1B1BA7

En general, los conocimientos adquiridos en grados/licenciaturas en Ciencias Físicas o Químicas son suficientes. Para aquellos estudiantes provenientes de otras disciplinas, el material complementario incluirá orientaciones para el estudio de conocimientos previos pertenecientes a los dos últimos apartados.

A su vez, la mayoría del material bibliográfico está en inglés, por lo que es preciso un buen conocimiento de este idioma a nivel científico-técnico. Además, el estudiante ha de estar familiarizado con el uso de ordenadores, ya que buena parte del trabajo de la asignatura está orientado a la ejecución de programas de cálculo.

4.RESULTADOS DE APRENDIZAJE

Conocimientos:

- Comprensión de la complejidad intrínseca de la correlación (electrónica, por ejemplo) en sistemas cuánticos de muchos cuerpos.
- Aprender a 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.
- 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.

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.

5.CONTENIDOS DE LA ASIGNATURA

TEMA 1: El problema de muchos electrones en física de la materia condensada

Tras recordar algunos aspectos esenciales de la descripción de los sistemas cuánticos, abordaremos el estudio genérico de las propiedades físicas de sistemas formados por muchos electrones (cuya exposición más formal es el objeto de la asignatura “Teoría cuántica de muchas partículas”). Completaremos el tema con la exposición de algunas técnicas de resolución numérica de la ecuación de Schrödinger.

TEMA 2: El formalismo del funcional de la densidad para el estado fundamental

En este tema estudiaremos los aspectos esenciales de la Teoría del funcional de la densidad y veremos cómo es posible aplicarla al cálculo de las propiedades del estado fundamental (estado de menor energía) y relacionar estas propiedades con las características estructurales de los materiales. Aplicaremos esta técnica a sistemas modelos sencillos y a estructuras más complejas usando software de cálculo/simulación avanzado.

TEMA 3: El formalismo del funcional de la densidad dependiente del tiempo

Aquí abordaremos de manera somera la aplicación de la teoría del funcional de la densidad al estudio de propiedades de excitación electrónica inducidas por campos externos. A su vez relacionaremos estas propiedades con técnicas

Ámbito: GUI - 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/
23B05CD2EA54FECAF502B8C43F1B1BA7

experimentales de caracterización espectroscópica.

TEMA 4: Perspectivas y problemas abiertos

En esta última parte describiremos algunos aspectos de investigación abiertos, como son la simulación de las propiedades electrónicas de nanoestructuras y sistemas biológicos, el estudio de transporte cuántico y la teoría de control y "monitorización" de sistemas cuánticos. Veremos cómo los conocimientos adquiridos en la asignatura sirven para abordar estos temas de investigación.

6.EQUIPO DOCENTE

- JOSE ENRIQUE ALVARELLOS BERMEJO
- DAVID GARCIA ALDEA

7.METODOLOGÍA

La metodología de la asignatura está basada en la enseñanza a distancia, principalmente 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:

- Una página de bienvenida con la información general de la asignatura.
- Un calendario donde se establece el orden temporal de actividades y prácticas.
- Material didáctico específico (teórico y práctico) de la asignatura.
- Enlaces a los recursos informáticos necesarios para la realización de las prácticas.
- Enlaces a material bibliográfico complementario.
- Herramientas de comunicación: foros de debate, correo electrónico y plataforma de entrega de los informes de los trabajos prácticos.

Siguiendo el esquema temporal del calendario 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 material también incluye problemas propuestos cuyas soluciones aparecen en el curso virtual. El objetivo de estos ejercicios es afianzar los conceptos teóricos básicos y proporcionar al estudiante un procedimiento fiable de autoevaluación.

El curso se completa con la realización a lo largo del mismo de cuatro trabajos prácticos, usando las herramientas informáticas adecuadas. En estos trabajos prácticos se aplicarán los conocimientos teóricos adquiridos a problemas específicos.

8.BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

Comentarios y anexos:

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,

Ámbito: GUI - 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/
23B05CD2EA54FECAF502B8C43F1B1BA7

ISBN:978-0195092769).
Esta obra es especialmente útil para los dos primeros temas del curso. Siendo 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 ofrece una perspectiva actual y rigurosa de los fundamentos y aplicaciones de la teoría del funcional de la densidad dependiente del tiempo.

9.BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

Comentarios y anexos:

El material bibliográfico básico se complementará con la lectura de artículos científicos, que son de interés para la realización de los trabajos prácticos.

10.RECURSOS DE APOYO AL ESTUDIO

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

El estudiante ha de prestar particular atención a:

- Los contenidos teóricos básicos,
- Guiones de los trabajos prácticos
- Ficheros pdf con las soluciones de los ejercicios de autoevaluación propuestos.
- Enlaces a los artículos que constituyen la bibliografía complementaria.

11.TUTORIZACIÓN Y SEGUIMIENTO

El medio básico de comunicación entre estudiantes y equipo docente son las herramientas de comunicación del Curso virtual (Correo y Foros de debate). Además, podrán utilizarse el correo electrónico, el teléfono y la entrevista personal.

Profesor: Pablo García González
E-mail: pgarcia@fisfun.uned.es
Despacho: 207 - Facultad de Ciencias

Profesor: J. E. Alvarellos
E-mail: jealvar@fisfun.uned.es
Teléfono: 91 398 7120
Horario: Miércoles, de 16 a 20 h
Despacho: 207 - Facultad de Ciencias

12.EVALUACIÓN DE LOS APRENDIZAJES

Se realizará a partir de la realización de cuatro prácticas en las que el estudiante, de manera individual, aplicará códigos de cálculo de primeros principios a problemas relacionados con propiedades electrónicas. La calificación se determinará a partir de la ejecución efectiva de estas prácticas, junto con la presentación de sus correspondientes informes que incluirán la respuesta a cuestiones relacionadas con las prácticas planteadas previamente por el equipo docente.

Se valorará positivamente a la hora de establecer la calificación final la participación activa del estudiante en los foros de discusión dentro del curso virtual.

Ámbito: GUI - 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/
23B05CD2EA54FECAF502B8C43F1B1BA7

Optativamente, y siempre en colaboración con otros estudiantes (grupos de tres personas como máximo) se podrán realizar trabajos más avanzados que sean sugeridos por el equipo docente. Estos trabajos pueden incrementar la calificación final hasta un 20%.

13.COLABORADORES DOCENTES

Véase equipo docente.

Ámbito: GUI - 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/
23B05CD2EA54FECAF502B8C43F1B1BA7