

MATERIA DE DOCTORADO
DOCTORADO EN CIENCIA Y TECNOLOGÍA MENCION FISICA
INSTITUTO SABATO

PRIMER CUATRIMESTRE 2015

**ESTRUCTURA ELECTRONICA DE MATERIALES: TÉCNICAS DE CÁLCULO DESDE
PRIMEROS PRINCIPIOS**

Docentes: María Andrea Barral, Verónica L. Vildosola

Primera parte

1) Introducción:

- Temas generales de física de materiales abordados desde la estructura electrónica.
- De los átomos aislados a los sólidos: origen de la estructura electrónica.
- Clasificación de los sólidos mediante sus tipos de enlaces químicos.
- Repaso de Física del estado sólido: Red de Bravais. Espacio recíproco. Teorema de Bloch. La aproximación de Born-Oppenheimer. Teoría de Bandas.

2) Gas de electrones uniforme y metales simples.

Aproximación no interactuante. Apantallamiento de Thomas-Fermi. Aproximación de Hartree-Fock. “Agujero” de correlación.

3) Teoría de la Funcional Densidad (DFT).

- Método de Thomas-Fermi.
- Teoremas de Hohenberg-Kohn
- Método Kohn-Sham: problema efectivo de una partícula. Ecuaciones variacionales.
- Funcionales de intercambio y correlación electrónica: La aproximación local de la densidad (LDA), la aproximación de gradiente generalizado (GGA).
- Más allá de LDA: funcionales dependientes del orbital (DFT+U), Corrección de “auto-interacción SIC, Funcionales híbridas, correcciones de Van der Waals.

4) Distintas implementaciones de DFT

- Full Potential*, Pseudopotenciales
- Diferentes funciones base para escribir la matriz hamiltoniana
- Diferentes métodos: KKR – *All electron* basado en bases aumentadas – Pseudopotenciales con base de ondas planas , con bases localizadas y con bases gaussianas.

Segunda parte

5) Aplicaciones a diversos problemas a elección para el laboratorio computacional. Por ejemplo...

- Materiales basados en carbono: Grafeno, grafito, nanotubos. Efectos de dimensionalidad.
- Manipulación atómica y efectos de dimensionalidad en cadenas atómicas, superficies, nanoagregados.
- Estado fundamental magnético de algunos metales de transición (ferromagnetismo, antiferromagnetismo, ondas de espín).
- Estructura electrónica de algunos materiales superconductores.
- Materiales aplicables a espintrónica
- Materiales tipo Peierls: buscando superconductores se encontraron aislantes

Bibliografía tentativa

- Richard M. Martin, *Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods*, Cambridge University Press (2004).
- Neil W. Ashcroft , N. David Mermin, *Solid State Physics*, Holt, Rinehart and Winston (1976).
- Adrian Sutton, *Electronic Structure of Materials*, Oxford University Press (2004).
- Robert G. Parr and Weitao Yang, *Density-Functional Theory of atoms and molecules*, Oxford University Press- New York (1989).