

**ASIGNATURA DE MÁSTER:**

UNED

# FUNCIONAL DE LA DENSIDAD: SISTEMAS ELECTRÓNICOS

Curso 2017/2018

(Código: 21156153)

## 1. PRESENTACIÓN

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%.

## 2. CONTEXTUALIZACIÓN

Dentro del presente Máster, esta asignatura proporciona conocimientos y herramientas básicos para el estudio de técnicas de cálculo de *primeros principios*, que actualmente son muy usadas en la evaluación de las propiedades electrónicas de sistemas cuánticos.

Como se ha comentado en la presentación, estas técnicas se utilizan tanto en campos cercanos a la Materia Condensada (Física del Estado Sólido, Nanotecnología, etc.) como en aquellos que pueden entenderse más relacionados con la Química Cuántica (propiedades de moléculas, interacción de las mismas con otros sistemas, ...).

La asignatura pertenece al Módulo "Física estadística de sistemas complejos" y sus contenidos preceden y preparan a los de "Procesos microscópicos en materia condensada" (si bien esta asignatura es más descriptiva), que se desarrolla en el segundo

cuatrimestre.

### 3. REQUISITOS PREVIOS RECOMENDABLES

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).

### 4. 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 sistema 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.

## 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. 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) de un sistema de electrones 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 asociadas a las excitaciones electrónicas que son inducidas por campos externos. A su vez, relacionaremos estas propiedades con técnicas experimentales de caracterización espectroscópica.

TEMA 4: Perspectivas y problemas abiertos

En esta última parte describiremos algunos aspectos de investigación abiertos, como son el cálculo 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, 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.

## 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, 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.

## 9. BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

Comentarios y anexos:

El material bibliográfico básico se podrá complementar con la lectura de artículos científicos 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:

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

## 11. TUTORIZACIÓN Y SEGUIMIENTO

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. Alvarellos  
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

## 12. EVALUACIÓN DE LOS APRENDIZAJES

Se realizará a partir de la realización de cinco Tareas prácticas en las que el estudiante, de manera individual, aplicará entre otras cosas códigos de cálculo de primeros principios a sistemas de los que se quiere estudiar sus propiedades electrónicas (estabilidad de moléculas y formación del enlace químico, cálculo de estructuras de bandas en metales y semiconductores,...). Las Tareas y los plazos de entrega se anunciarán en el Curso Virtual.

Por consiguiente, el estudiante ha de estar familiarizado con el uso de ordenadores, ya que buena parte de las Tareas mencionadas se basan en la ejecución de programas de cálculo (si bien estos programas se aportan por el equipo docente).

Estas Tareas se plantean de manera que el estudiante debe mostrar cierta independencia, dado que este es un máster a distancia con un enfoque académico investigador, por lo que se valorarán los aspectos más originales del trabajo realizado (no se van a calificar, pues como si fuesen problemas o exámenes cerrados). Se quiere motivar especialmente a los estudiantes a que realicen análisis de aquellos puntos que les han llamado la atención en cada Tarea y que presenten conclusiones claras de su trabajo.

La calificación se determinará a partir de la ejecución de estas Tareas y la presentación de sus correspondientes informes, que han de incluir una discusión detallada y crítica del trabajo realizado. Como guía general, en esas memorias se debe "explicar el trabajo que han realizado, justificándolo debidamente", y no solamente limitarse a "describir paso a paso lo que han hecho".

Se requerirá una calificación mínima en cada trabajo. Si todos los trabajos superan esta calificación mínima, la calificación final será la media ponderada de las calificaciones individuales.

Los estudiantes que por alguna circunstancia no puedan seguir el calendario ordinario podrán entrar en la convocatoria de septiembre. Estos estudiantes deberán entregar una parte de los trabajos antes del 30 de junio y el resto antes del 20 de septiembre. El

número concreto de trabajos a entregar en cada fecha y los plazos exactos de entrega se anunciarán en el Curso Virtual.

Finalmente, se valorará muy positivamente a la hora de establecer la calificación final la participación activa del estudiante en los foros de discusión del curso virtual.

### 13. COLABORADORES DOCENTES

Véase equipo docente.