



Dades generals

Nom de l'assignatura: Estructura Electrònica en Sòlids

Codi de l'assignatura: 572557

Curs acadèmic: 2015-2016

Coordinació: PERE ALEMANY CAHNER

Departament: Departament de Ciència de Materials i Química Física

Crèdits: 3

Programa únic: S

Hores estimades de dedicació

Hores totals 75

Activitats presencials	30
- Teoria	14
- Pràctiques d'ordinadors	16
Treball tutelat/dirigit	10
Aprendentatge autònom	35

Blocs temàtics

Parte 1. TEORIA (21 h)

Introducción. Modelización de materiales: sistemas, modelos, propiedades e interdisciplinaridad.

- Tipos de sólidos y propiedades. Tipo de enlace. Propiedades. Estructuras ordenadas y desordenadas. Sólidos cristalinos y defectos.
- Simetría en los sistemas periódicos: Cristales y retículos. Simetría translacional, simetría puntual y grupos espaciales.
- Red recíproca y zonas de Brillouin. Teorema de Bloch y funciones de Bloch.
- Sistemas de dimensionalidad reducida. Superficies. Polímeros. Defectos en sólidos.
- Teoría de bandas. Ecuación de Schrödinger y teorema de Bloch. Bases y simplificaciones.
- Modelos monoelectrónicos: del gas de electrones a los métodos basados en la teoría del funcional de la densidad.
- Estructura de bandas y densidad de estados. Energía de Fermi.
- Estructura de bandas de sólidos simples

Parte 2: APLICACIONES (9h)

REFERENCES

Basic

- J.C. Paniagua, P. Alemany *Química Quàntica*, Vols. 1-3, Llibres de l'Index, Barcelona 1999.
- A. Szabo, N- Ostlund *Modern Quantum Chemistry*, Mc Graw Hill, New York, 1989.
- W. Koch, M.C. Holthausen *A Chemist's Guide to Density Functional Theory*, Wiley-VCH, Weinheim, 2002.
-

Advanced

- T. Helgaker, P. Jørgensen, J. Olsen *Molecular Electronic Structure Theory*, Wiley, Chichester, 2012.

General aspects of the course

A substantial part of the course is devoted to develop practical skills related to the calculation of the electronic structure of molecules with the aim that students that complete the course should be able to understand the basic computational procedures underlying the standard packages used in quantum chemistry. For this reason about half of the course will be devoted to the introduction of theoretical concepts (T) and the other half to the application of these concepts to real cases, either writing short programs to calculate the electronic structure for simple systems using different methods in the second part of the course dedicated to applied examples using a standard quantum chemical package to explore more complex cases (P).

Course evaluation

Each student will have an individual homework assignment that will consist in a literature search and the calculation of the electronic structure of a given molecule using different quantum chemical methods. The final grade will be awarded on the basis of a written dissertation and a short oral presentation (approx. 10 min) describing this homework.

Departments involved in the course

Departament de Química Orgànica, Universitat de Barcelona.
Departament de Química Física, Universitat de Barcelona.