

## Especialidad: Materia Condensada

<b>Nombre del curso</b>	<b>TÓPICOS ESPECIALES EN FÍSICA DE MATERIA CONDENSADA I y II: TEORÍA DEL FUNCIONAL DE LA DENSIDAD</b> Código USM: FIS495/FIS496 Código PUCV: FIS874/FIS875
<b>Descripción del curso</b>	Este curso enseña las bases teóricas del formalismo del funcional densidad y enseña a utilizar algunas herramientas computacionales de tal manera que el alumno pueda realizar sus propios cálculos de propiedades electrónicas y/o elásticas de materiales, especialmente aleaciones sólidas cristalinas y también en superficies.
	<b>Asignatura: Especialidad – Materia Condensada</b> PREREQUISITOS: Física de Sólidos I, Física Computacional, Mecánica Cuántica I Créditos USM: 5 Créditos PUCV: 7 Horas Semanales Cátedra: 4 Horas Semanales Ayudantía: - Horas Semanales Laboratorio: -
<b>Objetivos</b>	Preparar al alumno para realizar cálculos de la estructura electrónica de materiales sólidos utilizando el formalismo del funcional densidad.
<b>Contenidos</b>	1.- Teoría funcional densidad, marco teórico 2.- Métodos de cálculo de la estructura electrónica de sólidos. 3.- Métodos numéricos DFT, (VASP, LMTO, Quantum Espresso) 4.- Ecuación de estado y propiedades elásticas. 5.- Cálculo de superficies.
<b>Modalidad de evaluación</b>	Tareas y presentaciones orales
<b>Bibliografía</b>	<b>Básica:</b> <ul style="list-style-type: none"> <li>▪ “Electronic structure: Basic theory and practical methods”, Richard M. Martin, Cambridge University press, 2004.</li> <li>▪ “Density Functional theory: A practical introduction”, David S. Sholl And Jan Steckel, Wiley (2009).</li> <li>▪ • “Handbook of the band structure of elemental solids”, Dimitri A. Papaconstantopoulos, Springer (2015).</li> </ul> <b>Recomendada:</b> Lectura de Papers y Monografías recientes de cálculos DFT para diversos materiales de interés.