

GUÍA DE ESTUDIO PÚBLICA



TEORÍA DEL FUNCIONAL DE LA DENSIDAD: SISTEMAS ELECTRÓNICOS

CÓDIGO 21580013

23-24

TEORÍA DEL FUNCIONAL DE LA
DENSIDAD: SISTEMAS ELECTRÓNICOS
CÓDIGO 21580013

ÍNDICE

PRESENTACIÓN Y CONTEXTUALIZACIÓN
REQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES PARA CURSAR ESTA
ASIGNATURA
EQUIPO DOCENTE
HORARIO DE ATENCIÓN AL ESTUDIANTE
COMPETENCIAS QUE ADQUIERE EL ESTUDIANTE
RESULTADOS DE APRENDIZAJE
CONTENIDOS
METODOLOGÍA
SISTEMA DE EVALUACIÓN
BIBLIOGRAFÍA BÁSICA
BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA
RECURSOS DE APOYO Y WEBGRAFÍA
IGUALDAD DE GÉNERO

Nombre de la asignatura	TEORÍA DEL FUNCIONAL DE LA DENSIDAD: SISTEMAS ELECTRÓNICOS
Código	21580013
Curso académico	2023/2024
Título en que se imparte	MÁSTER UNIVERSITARIO EN FÍSICA AVANZADA
Tipo	CONTENIDOS
Nº ETCS	6
Horas	150.0
Periodo	SEMESTRE 1
Idiomas en que se imparte	CASTELLANO

PRESENTACIÓN Y CONTEXTUALIZACIÓN

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). Como es lógico, se prestará especial atención a la denominada “Teoría del funcional de la densidad”, que actualmente es 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%.

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 ya se ha comentado, 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 Teórica”, pero puede ser de interés para aquellos interesados en el módulo “Física Computacional” ya que, como se ha indicado, es muy

formativa para aquellas personas que quieran enfocar su actividad futura en cálculos dentro de las áreas de Física de la Materia Condensada, Física de Materiales, Química Teórica, Nanociencia y nanotecnología, Química-Física, etc.

REQUISITOS Y/O RECOMENDACIONES PARA CURSAR ESTA ASIGNATURA

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 pudieran 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. Sin embargo, debe hacerse notar que es necesario conocerlos bien.

Por otra parte, el estudiante ha de estar bien familiarizado con el uso de ordenadores, ya que buena parte del trabajo de la asignatura (y de las tareas que permiten la evaluación de la misma) está basado en la ejecución de programas de cálculo. Aunque no es necesario hacer cambios en la programación de los mismos, ya que son programas que bien son de uso público o bien se aportan por el equipo docente, sí es muy conveniente tener conocimientos de programación científica para trabajar más cómodamente en la asignatura.

EQUIPO DOCENTE

Nombre y Apellidos
Correo Electrónico
Teléfono
Facultad
Departamento

JOSE ENRIQUE ALVARELLOS BERMEJO
jealvar@fisfun.uned.es
91398-7120
FACULTAD DE CIENCIAS
FÍSICA FUNDAMENTAL

Nombre y Apellidos
Correo Electrónico
Teléfono
Facultad
Departamento

DAVID GARCIA ALDEA (Coordinador de asignatura)
dgaldea@fisfun.uned.es
91398-7636
FACULTAD DE CIENCIAS
FÍSICA FUNDAMENTAL

Nombre y Apellidos
Correo Electrónico
Teléfono
Facultad

JULIO JUAN FERNANDEZ SANCHEZ
jjfernandez@fisfun.uned.es
91398-7142
FACULTAD DE CIENCIAS

HORARIO DE ATENCIÓN AL ESTUDIANTE

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: David García Aldea

E-mail: dgaldea@fisfun.uned.es

Teléfono: 91 398 7136

Horario: Martes, de 16 a 20 h

Edificio Biblioteca UNED, planta 1 (Mediateca). Paseo Senda del Rey 5. 28040 Madrid, España

Profesor: J. E. Alvarellós

E-mail: jealvar@fisfun.uned.es

Teléfono: 91 398 7120

Horario: Miércoles, de 12 a 14h y de 16 a 18h

Edificio Biblioteca UNED, planta 1 (Mediateca). Paseo Senda del Rey 5. 28040 Madrid, España

Profesor: . Julio Juan Fernández Sánchez

E-mail: jjfernandez@fisfun.uned.es

Teléfono.: 91 398 71 42.

Horario: Miércoles de 10:00 a 12:00 h y de 16:00 a 18:00 h.

Edificio Biblioteca UNED, planta 1 (Mediateca). Paseo Senda del Rey 5. 28040 Madrid, España

COMPETENCIAS QUE ADQUIERE EL ESTUDIANTE

COMPETENCIAS BÁSICAS

CB6 - Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación

CB7 - Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.

CB8 - Que los estudiantes sean capaces de integrar conocimientos y enfrentarse a la complejidad de formular juicios a partir de una información que, siendo incompleta o limitada, incluya reflexiones sobre las responsabilidades sociales y éticas vinculadas a la aplicación de sus conocimientos y juicios

CB9 - Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y

sin ambigüedades

CB10 - Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida auto dirigido o autónomo.

COMPETENCIAS GENERALES

CG01 - Adquirir capacidad de análisis y síntesis.

CG02 - Adquirir capacidad de organización y planificación.

CG03 - Adquirir conocimientos de informática relativos al ámbito de estudio

CG04 - Adquirir capacidad de gestión de información

CG05 - Adquirir capacidad para resolución de problemas

CG07 - Ser capaz de trabajar en equipo

CG08 - Adquirir razonamiento crítico

CG10 - Adquirir capacidad de aprendizaje autónomo

CG11 - Adquirir capacidad de adaptación a nuevas situaciones

COMPETENCIAS ESPECÍFICAS

CE01 - Saber utilizar y relacionar los diferentes tipos de descripción (microscópica, mesoscópica y macroscópica) de los fenómenos físicos

CE02 - Comprender las propiedades cualitativas de las soluciones a las ecuaciones de la física (sus tipos, estabilidad, singularidades, etc.) y su dependencia de los parámetros que definen un sistema físico

CE03 - Comprender el papel del ruido y las fluctuaciones en los fenómenos físicos y manejar su modelización matemática

CE04 - Comprender y saber relacionar matemáticamente las propiedades macroscópicas de un sistema con las interacciones y la geometría de los elementos microscópicos del mismo

CE05 - Capacidad de análisis de problemas nuevos en sistemas poco conocidos y determinar similitudes y diferencias con modelos de referencia

CE06 - Capacidad de formular modelos matemáticos en términos de ecuaciones diferenciales (ordinarias o en derivadas parciales)

CE07 - Saber construir modelos numéricos para fenómenos descritos por ecuaciones diferenciales (ordinarias o en derivadas parciales) con diferentes condiciones iniciales o de contorno

CE08 - Capacidad de realizar análisis críticos de resultados experimentales, analíticos y numéricos

CE09 - Capacidad de búsqueda de bibliografía y fuentes de información especializadas. Manejo de las principales bases de datos de bibliografía científica y de patentes

CE10 - Conocimiento avanzado del estado actual y la evolución de un campo de investigación concreto

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 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.
- 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.

CONTENIDOS

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, viendo cómo los conocimientos adquiridos en la asignatura sirven para abordar estos temas de investigación

METODOLOGÍA

La metodología de la asignatura está basada en la enseñanza a distancia mediante el uso del curso virtual implementado en la plataforma docente de la UNED, siendo la pieza fundamental el trabajo autónomo personal y continuado del estudiante.

Dentro de ese 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 consulta y debate, 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 evalúa mediante la realización a lo largo del mismo de cinco Tareas, en las que se usan herramientas informáticas para la realización de los cálculos y para la escritura de

las memorias correspondientes. En estos trabajos prácticos se aplicarán los conocimientos teóricos adquiridos a sistemas físicos específicos.

SISTEMA DE EVALUACIÓN

TIPO DE PRUEBA PRESENCIAL

Tipo de examen

No hay prueba presencial

CARACTERÍSTICAS DE LA PRUEBA PRESENCIAL Y/O LOS TRABAJOS

Requiere Presencialidad

No

Descripción

La evaluación de la asignatura se realizará a partir de la realización individual de cinco Tareas prácticas y de las memorias presentada sobre ellas. En las tareas el estudiante, entre otras cosas, hará uso de códigos de cálculo para estudiar diversos sistemas físicos. Se analizarán especialmente sus propiedades electrónicas (estabilidad de las moléculas, 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.

El estudiante, por tanto, 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 son de uso público o se aportan por el equipo docente).

Uno de los objetivos principales de las Tareas es que el estudiante muestre madurez e independencia, dado el enfoque académico investigador del máster. Por ese motivo, deben los estudiantes prestar atención a los aspectos más originales, y analizar aquellos puntos que le llamen la atención en cada Tarea.

Criterios de evaluación

Dado que el máster tiene un enfoque académico investigador, las Tareas se plantean de manera que el estudiante demuestre independencia. Se valorarán, pues, los aspectos más originales y personales del trabajo realizado (no se van a calificar las tareas como si fuesen problemas o exámenes cerrados). Especialmente, se quiere motivar a los estudiantes a que analicen aquellos puntos que más le llamen 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 se ha realizado, justificándolo debidamente, sin limitarse a describir meramente los pasos que se han ido haciendo.

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.

Se valorará también muy positivamente la participación activa del estudiante en los foros de discusión del curso virtual.

Ponderación de la prueba presencial y/o los trabajos en la nota final

Fecha aproximada de entrega

Comentarios y observaciones

Las Tareas tendrán las siguientes fechas aproximadas de entrega:

Tarea 1: 20 de noviembre

Tarea 2: 10 de diciembre

Tarea 3: 5 de enero

Tarea 4: 20 de enero

Tarea 5: 10 de febrero.

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.

PRUEBAS DE EVALUACIÓN CONTINUA (PEC)

¿Hay PEC? No

Descripción

Criterios de evaluación

Ponderación de la PEC en la nota final

Fecha aproximada de entrega

Comentarios y observaciones

OTRAS ACTIVIDADES EVALUABLES

¿Hay otra/s actividad/es evaluable/s? No

Descripción

Criterios de evaluación

Ponderación en la nota final

Fecha aproximada de entrega

Comentarios y observaciones

¿CÓMO SE OBTIENE LA NOTA FINAL?

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 se ha realizado, justificándolo debidamente, y no limitarse a describir paso a paso lo que se ido haciendo.

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 (véase la ponderación más abajo, que es necesariamente aproximada ya que se quiere hacer una evaluación global de la asignatura en base al conjunto de las tareas).

Se valorará también muy positivamente la participación activa del estudiante en los foros de discusión del curso virtual.

Tarea 1 (aproximadamente, un 15%)

Tarea 2 (aproximadamente, un 15%)

Tarea 3 (aproximadamente, un 20%)

Tarea 4 (aproximadamente, un 20%)

Tarea 5 (aproximadamente, un 30%)

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

Los contenidos teóricos de la asignatura están disponibles directamente en el curso virtual.

Por otra parte, 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 más antiguo, 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 rigurosa de los fundamentos y aplicaciones de la teoría del funcional

de la densidad dependiente del tiempo.

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

El material bibliográfico básico se podrá complementar con la lectura de artículos científicos de interés para la realización de los trabajos prácticos.

RECURSOS DE APOYO Y WEBGRAFÍA

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 de la asignatura, tanto en aquellos aportados en el curso como en los que están la bibliografía recomendada.
 - 2.- Guiones de las Tareas (trabajos prácticos).
 - 3.- Enlaces a los artículos que constituyen la bibliografía complementaria.
-

IGUALDAD DE GÉNERO

En coherencia con el valor asumido de la igualdad de género, todas las denominaciones que en esta Guía hacen referencia a órganos de gobierno unipersonales, de representación, o miembros de la comunidad universitaria y se efectúan en género masculino, cuando no se hayan sustituido por términos genéricos, se entenderán hechas indistintamente en género femenino o masculino, según el sexo del titular que los desempeñe.