Simulación de Nanomateriales

Carácter del curso	Obligatoria para Licenciatura en Tecnologías de la Química (Perfil: Nanotecnología)
Semestre en que se dicta	Octavo semestre
Número de créditos	5
Carga horaria semanal (hs)	1 teórico de 2 h + 1 practico de 1h
Previaturas	Física 102
Cupo	Sin cupo para Licenciatura en Tecnologías de la Química y cupo máximo para otras carreras en función de inscriptos.

Estructura Responsable:
Ricardo Faccio

Docentes Responsables:
Ricardo Faccio
Luciana Fernández

Docentes Referentes:
Ricardo Faccio
Luciana Fernández
Martín Esteves

Objetivos:
El curso ofrece una breve introducción a métodos de simulación de estructura electrónica, principalmente basados en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT). Mediante el mismo se plantearán aspectos generales de la teoría, y aspectos prácticos específicos, que permitan mediante el uso de códigos disponibles el abordaje de estudio de materiales, principalmente para la descripción de fenómenos en la nanoescala. Se pretende que el estudiante incorpore los aspectos teóricos mediante la realización de prácticos de simulación computacional, que lo familiaricen con las propiedades de las nanoestructuras, al tiempo que incorporen manejo de software de simulación.

Contenido:

1) Introducción:
    a. Sistemas de muchas partículas
    b. Teoría de funcional de la Densidad:
        i. Bases localizadas
        ii. Bases extendidas

2) Estructura electrónica de sólidos
    a. Estructura electrónica de Sólidos (3D)
    b. Estructura electrónica de Superficies o sistemas bidimensionales (2D)
    c. Estructura electrónica de pequeñas moléculas (sistemas 0D)
    d. Bandas

   e. Densidad de estados electrónicos
3) Uso de códigos de estructura electrónica basados en DFT
   a. Quantum Espresso/VASP
   b. Introducción a Linux/Unix
   c. Ejecución Básica

4) Funcionales de Correlación e Intercambio en DFT
   a. El uso de LDA vs GGA
   b. Propiedades generales
   c. Nuevos funcionales

5) Optimización Estructural
   a. Optimización geométrica
   b. Dinámica Molecular ab initio
   c. Dinámica Molecular ab initio asistida por Machine Learning

6) Dinámica de Redes:
   a. Propiedades vibracionales de sólidos y nanomateriales
   b. Obtención de diagramas de dispersión
   c. Análisis Fonónico

Bibliografía:

"Introducción a la Física del Estado Sólido". Ch. Kittel.
"Solid State Physics". N. W. Ashcroft & N. D. Mermin
"Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods". R. Martin

Modalidad del Curso:

	Teórico	Practico	Laboratorio	Otros (*)
Asistencia Obligatoria		x		
Modalidad Flexible (carga horaria mínima)				

(*) Especificar (talleres, seminarios, visitas, tareas de campo, pasantías supervisadas, etc.)

Régimen de ganancia:

Trabajo final sobre un total de 60 puntos.

Si la nota es inferior a 18 puntos, se pierde el curso.

Si la nota total es mayor o igual a 18 y menor a 30 puntos, aprueba.

Si la nota total es mayor o igual a 30 puntos, exonera el curso.

Se requiere un mínimo de 80 % de asistencia al laboratorio.