



Universidad Andrés Bello
Facultad de Ciencias Exactas
Doctorado en Ciencias Físicas

Métodos Computacionales para la Física de Materiales

I.- IDENTIFICACIÓN

Nombre	:	Métodos Computacionales para la Física de Materiales
Código	:	Indicar código de Asignatura
Tipo de Actividad	:	
Modalidad	:	Presencial
Créditos Unab	:	Indicar total de créditos Unab
Créditos SCT	:	10

II.- DESCRIPCIÓN DEL CURSO

En el curso de métodos computacionales para la física de materiales se estudian distintas aproximaciones para el estudio de materiales mediante modernos algoritmos de análisis y software especializado. Las aplicaciones van dirigidas a modelos estocásticos, clásicos y mecano-cuánticos. Se estudiarán los modelos y sus implementaciones y/o softwares especializados en cada ámbito.

III.- OBJETIVOS

El estudiante tendrá la capacidad de implementar metodologías mesoscópicas para el estudio de materiales. Será capaz de utilizar distintos softwares para el análisis y estudios a escalas atómicas de materiales, en particular softwares enfocados a técnicas de dinámica molecular clásica y métodos ab-initio. El estudiante podrá discernir cuando se deben aplicar cada una de estas metodologías según el problema al que se enfrente, y estará capacitado a potenciar su uso en variadas áreas de investigación.

IV.- RESULTADOS DE APRENDIZAJE DE ASIGNATURA

Al finalizar el curso, el estudiante deberá:

- Ser capaz de implementar técnicas de simulación computacional.
- Comprender la columna vertebral de distintos softwares de simulación computacional en ciencia de materiales.
- Llevar a cabo análisis rigurosos de los resultados obtenidos de las simulaciones.
- Comparar resultados provistos en simulaciones computacionales con observaciones experimentales.

- Estar capacitado para desarrollar e implementar análisis a partir de datos obtenidos en simulaciones.

V.- CONTENIDOS

- Mecánica Estadística
 - Entropía y Temperatura
 - Ergodicidad
- Simulaciones Montecarlo
 - El método de Montecarlo
 - Algoritmos
 - Trial moves
 - Applications
- Simulaciones de Dinámica Molecular Clásica
 - Metodología
 - Ecuaciones de movimiento
 - Experimentos computacionales
- Cálculos de Estructura Electrónica
 - Estructura de bandas de sólidos y superficies
 - Propiedades vibracionales de sólidos
 - Propiedades ópticas de sólidos
- Dinámica Molecular Ab Initio
 - Born-Openheimer MD
 - Carr-Parrinello MD
 - Dinámica molecular de sólidos y líquidos

VI.- METODOLOGÍAS

El curso esté compuesto por una clase teórica y una clase práctica de 1.5 horas cronológicas cada una, que se llevarán a cabo en horario continuado. En la parte teórica el profesor expondrá el contenido a los alumnos/as con una explicación detallada de los conceptos y ejemplos. Luego el alumno deberá llevar a cabo una parte práctica con lo que se ha visto, esto será realizado por un proceso guiado paso a paso por el profesor. La clase se llevará a cabo en un laboratorio de computación que deberá contar con el software disponible.

VII.- MODALIDAD DE EVALUACIÓN

- Existirán 3 pruebas (P), que serán realizadas mediante el uso de computador, y que pueden o no incluir desarrollo analítico a realizar por el estudiante.
- Se realizarán ejercicios prácticos (E) cada dos semanas que deben ser reportados por los alumnos.
- La nota final será $NF = 0.6 \times P + 0.4 \times E$

VIII.- BIBLIOGRAFÍA

- Bibliografía Obligatoria

- Frenkel D. and Smit B. (2011). Understanding Molecular Simulation, 2nd Edition. Academic Press. ISBN-13: 978-0122673511
- Martin, R.M. (2008). Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods. Cambridge University Press. ISBN-13: 978-0521534406
- Marx, D. and Hutter, J. (2012). Ab Initio Molecular Dynamics: Basic Theory and Advanced Methods. Cambridge University Press. ISBN-13: 978-1107663534

- Bibliografía Recomendada
 - Sholl, D. and Steckel, J. A. (2009). Density Functional Theory: A Practical Introduction. Wiley-Interscience. ISBN-13: 978-0470373170
 - Kohanoff, J. (2006). Electronic Structure Calculations for Solids and Molecules: Theory and Computational Methods. Cambridge University Press. ISBN-13: 978-0521815918
 - Kaxiras, E. (2003). Atomic and Electronic Structure of Solids. Cambridge University Press. ISBN-13: 978-0521523394

- Artículos
 - P. Hohenberg and W. Kohn, Inhomogeneous Electron Gas, Phys. Rev. 136, B864 (1964).
 - W. Kohn and L. J. Sham, Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects, Phys. Rev. 140, A1133 (1965).
 - R. Car and M. Parrinello, Unified Approach for Molecular Dynamics and Density Functional Theory, Phys. Rev. Lett. 55, 2471 (1985).