



SOMOS
ARTE, CIENCIA Y
DESARROLLO
CULTURAL



MATERIA: PROPIEDADES ELECTRÓNICAS DE MATERIALES

DATOS GENERALES:

Descripción:	En física, el estudio y caracterización de las propiedades optoelectrónicas de materiales es de suma importancia. Para materiales cristalinos, este estudio lo constituye principalmente el determinar las propiedades electrónicas y ópticas de estos. Las propiedades electrónicas, estructura de bandas y densidad de estados electrónicos, son una propiedad de los materiales que permite determinar características como la conductividad óptica, la función dieléctrica ó todas las funciones respuesta a través de las relaciones de Kramers-Kronig.
Seriación y Correlación:	Subsecuentes: Mecánica Cuántica I.
	Consecuentes: N/A.
Objetivo:	El objetivo de esta unidad didáctica optativa es presentar y discutir, en general, los diferentes métodos que existen para resolver la ecuación de Schrödinger para materiales. Analizaremos las propiedades electrónicas de algunos sistemas característicos, como son los aislantes, semiconductores y conductores.
Objetivos específicos:	<ul style="list-style-type: none">● Introducir los métodos convencionales para para determinar la estructura electrónica de los materiales, entre los que están los métodos semi-empíricos y de primeros principios.● Describir las aproximaciones involucradas en los cálculos ab initio o de primeros principios, que fundamentan los cálculos en la teoría del funcional de la densidad.● Presentar los teoremas de Hohenberg y Kohn y las ecuaciones de Kohn-Sham, además de usar códigos gratuitos para determinar la estructura de bandas, densidad de estados y parte imaginaria de la función dieléctrica, así como algunas propiedades ópticas básicas de materiales.
Horas totales del curso:	(90) horas presenciales + (30) horas de autoestudio=120 horas totales
Créditos:	8 créditos



SOMOS
ARTE, CIENCIA Y
DESARROLLO
CULTURAL



REVISIONES Y ACTUALIZACIONES:

Líneas de investigación:	Materia Condensada y Nanotecnología. Estado Sólido
Autores o Revisores:	Dr. Juan Carlos Martínez Orozco. Dr. Jorge Alberto Vargas Téllez
Fecha de actualización	15 de noviembre de 2023
Sinopsis de la revisión y/o actualización:	Esta revisión es debida al proceso de reacreditación CAPEF, de una materia que se imparte en la licenciatura en física de la Universidad Autónoma de Zacatecas.

PERFIL DESEABLE DEL DOCENTE:

Disciplina profesional:	Doctorado en Ciencias
Experiencia docente:	Experiencia profesional en investigación en temas relacionados a la asignatura y docencia mínima de un año.

ÍNDICE TEMÁTICO:

TEMA:	SUBTEMA
Repaso de bases de la mecánica Cuántica	<ul style="list-style-type: none"> ● La función de onda y su significado físico. ● La ecuación de Schrödinger. ● Postulados de la mecánica cuántica. ● El átomo de hidrogeno ● El espín del electrón
Métodos para determinar la estructura electrónica.	<ul style="list-style-type: none"> ● Métodos semiempíricos. ● Teoría de enlace fuerte (Tight-Binding). ● Tight -Binding ortogonal y no ortogonal.



SOMOS
ARTE, CIENCIA Y
DESARROLLO
CULTURAL



	<ul style="list-style-type: none"> • Formalismo de Slater-Koster. • Sistemas cristalinos más complejos.
Cálculos <i>ab initio</i> o de primeros principios.	<ul style="list-style-type: none"> • Fundamentos • Aproximación de Born-Oppenheimer. • El principio variacional • La aproximación de Hartree • La aproximación de Hartree-Fock.
Teoría del funcional de la densidad	<ul style="list-style-type: none"> • Los teoremas de Hohenberg y Kohn. • Las ecuaciones de Kohn-Sham • Funcionales de correlación e intercambio • La teoría del funcional de la densidad. • Dinámica molecular de primeros principios.
Aproximaciones y códigos.	<ul style="list-style-type: none"> • Pseudopotenciales • Funciones base. • Códigos usados comúnmente (Siesta, Quantum espresso, WIEN2k)
Cálculo de propiedades optoelectrónicas básicas.	<ul style="list-style-type: none"> • Relajación de estructuras y pruebas de convergencia. • Cálculo de bandas de energía (Números de onda y zonas de Brillouin). • Densidad de estados y densidad de estados proyectados. • Cálculo de propiedades ópticas a través de las relaciones de Kramers-Kronig.

BIBLIOGRAFIA

Principal:	<p>Richard. M. Martin. Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods. Second Edition (2020). Cambridge University Press.</p> <p>Peter Atkins and Ronald Friedman. Molecular Quantum Mechanics. Fifth edition (2011). Oxford University Press.</p> <p>Walter A. Harrison. Elementary Electronic Structure. Revised Edition (2004). World Scientific Publishing Company.</p>
Enlaces digitales:	N/A
Complementaria:	<p>Takeuchi, Noboru y Aldo Humberto Romero. Simulaciones computacionales de materiales y nanoestructuras. Fondo de cultura económica. Ediciones científicas universitarias (2019).</p> <p>Feliciano Giustino. Materials Modelling using Density Functional Theory. (2014). Oxford University Press.</p>

PLANEACIÓN EDUCACIONAL:



Competencias generales:	<ul style="list-style-type: none"> ● Capacidad de aprender y actualizarse permanentemente. ● Habilidades para buscar, procesar y analizar información procedente de fuentes diversas. ● Capacidad para identificar, plantear y resolver problemas. ● Adquirir hábitos de trabajo necesarios para el desarrollo de la profesión tales como el rigor científico, el autoaprendizaje y la persistencia.
Competencias específicas:	<ul style="list-style-type: none"> ● Plantear, analizar, y resolver problemas físicos teóricos mediante la utilización de métodos numéricos y analíticos. ● Demostrar una comprensión profunda de los conceptos básicos de la física moderna y de heteroestructuras. ● Identificar las leyes de las físicas involucradas en los problemas del confinamiento cuántico. ● Utilizar o elaborar programas o sistemas de computación para el procesamiento de información, cálculo numérico y simulación de procesos físicos. ● Describir y explicar fenómenos naturales y procesos tecnológicos en términos de conceptos, teorías y principios físicos. ● Demostrar disposición para enfrentar nuevos problemas en otros campos, utilizando sus habilidades específicas. ● Buscar, interpretar y utilizar literatura científica. ● Aplicar el conocimiento teórico de la física a la realización e interpretación de resultados numéricos.

CONTRIBUCIÓN AL PERFIL DE EGRESO:

CONOCIMIENTO:	HABILIDADES:	VALORES:
El estudiante tendrá un conocimiento teórico básico, pero sólido, del concepto de sistemas cuánticos nanoestructurados. Sabrá como plantear y resolver el problema de pozos cuánticos en presencia de campos eléctricos y magnéticos.	El estudiante obtendría la habilidad de plantear y resolver, de manera numérica y analítica, el problema de heteroestructuras cuánticas simples, generando graficas de calidad y reportes científicos.	Se inculca el valor del trabajo individual y colectivo para resolver problemas científicos. Respetando siempre el rigor científico, al validar lo resultado y respetar las fuentes y resultados previos.



SOMOS
ARTE, CIENCIA Y
DESARROLLO
CULTURAL



ESTRATEGIAS PEDAGÓGICAS:

Estrategias de enseñanza:	Estrategias de aprendizaje:
<ul style="list-style-type: none">• El docente explicará la teoría y presentará ejemplos en las clases presenciales.• El docente presentará los procedimientos y métodos teóricos y numéricos para resolver los problemas.• Se plantearán proyectos, que incluyan la revisión bibliográfica y desarrollo de simulaciones, así como correcta presentación y discusión.	<ul style="list-style-type: none">• El estudiante trabajará en forma individual o por equipo en la comprensión de conceptos y la resolución de problemas.• El estudiante resolverá problemas análogos a los planteados en clase para reforzar los conocimientos adquiridos.• El estudiante contestará, con el acompañamiento del docente, hará un informe científico con calidad de publicación.

PROPUESTA DE CRITERIOS DE EVALUACIÓN:

Criterio de evaluación:	Porcentaje:
Exámenes parciales	20 %
Tareas	20 %
Exposiciones	N/A
Participación en clase	N/A
Asistencia	N/A
Proyecto	60 %