

# Estructura Electrónica de la Materia

## 1. Introducción

Conceptos básicos de Mecánica Cuántica

El gas de electrones libres

El átomo de Hidrógeno

La Tabla Periódica

## 2. Moléculas Diatómicas

Homonucleares

Heteronucleares

Orbitales Moleculares

Orbitales Híbridos

Moléculas Exóticas

## 3. Conceptos Útiles

Electronegatividad

Energía y orden de enlace

Enlaces  $\sigma, \pi, \delta \dots$

## 4. Desde lo finito a lo infinito

Teorema de Bloch

Sistemas periódicos en una dimensión

Electrón libre

Modelo de Kronig-Penney

Tight binding

Sistemas periódicos en dos y tres dimensiones.

Clasificación de materiales de acuerdo a la estructura de bandas: Metales, semiconductores y aislantes

Transición metal-aislante

Efecto de la presión

Aislante de Anderson

5. Teoría Cuantitativa Moderna  
Método de Hartree-Fock y correcciones  
Método de Kohn y Sham y avances  
Pseudopotenciales

6. Tópicos

Profesores: Carlos Cárdenas y Patricio Fuentealba

Bibliografía

A. Sutton, Electronic Structure of matter

D. Pettifor, Bonding and Structure of Molecules and  
Solids

J. Burdett, Chemical Bonding in Solids

R. Martin. Electronic Structure. Basic Theory and  
Practical Methods

J. Kohanoff, Electronic Structure Calculations for  
Solids and Molecules