

Curso de postgrado

CS07FI0022: Simulación de materiales

15 U.D. o 10 créditos

Profs.: y Carlos Cárdenas , Gonzalo Gutiérrez, Eduardo Menendez (Coordinador) y Francisco Muñoz.

Requisitos

Experiencia en uso de sistema operativo Linux.

Nociones de mecánica cuántica.

Objetivos

Este curso está destinado a que el estudiante tenga un contacto temprano con la actividad de investigación en teoría y simulación de materiales, constituyendo un complemento a los cursos tradicionales de física o química del estado sólido.

El curso consiste en una serie de actividades teórico-prácticas que cubren diferentes aspectos de la simulación de materiales y un proyecto de investigación, que puede tomarse con otro profesor del claustro especialista en la temática.

Plan de temas y prácticas:

A) Dinámica Molecular (Prof. Gonzalo Gutiérrez)

- 1) Especificación de estructuras moleculares y cristalinas. Visualización. Simulación de movimiento atómico. Implementación de un programa sencillo de dinámica molecular.
- 2) Análisis de dinámica molecular. Programación de la función de distribución de pares. Uso básico de un programa avanzado de dinámica molecular (p. Ej. LAMMPS). Propiedades mecánicas del grafeno y otro material.

B) Estructura Electrónica I: Tight-Binding (Prof. Francisco Muñoz)

- 3) Método *tight-binding* (Hückel). Moléculas diatómicas, cadenas lineales.
- 4) Sistemas bidimensionales. Grafeno.

C) Estructura Electrónica II: Métodos DFT (Prof. Eduardo Menéndez)

- 5) Método DFT. Cálculos DFT para moléculas y cristales.
- 6) Cálculo de propiedades: densidad de estados, diagrama de bandas, absorción de luz.

D) Cuantificación de conceptos químicos usando DFT (Prof. Carlos Cárdenas)

- 7) Teoría de las funciones de respuesta química en DFT (*conceptual-DFT*)
- 8) Herramientas topológicas para la descripción del enlace químico: Función de localización electrónica y teoría de átomos en moléculas.

E) Proyecto de investigación

- 9) Proyecto a desarrollar entre las semanas 11 y 18.

Evaluación:

Tres tareas (20% c/u).

Un proyecto de investigación: 20% memoria escrita y 20% exposición oral.

Bibliografía

Básica:

1. D. Frenkel y B. Smit, Understanding molecular simulation.
2. D. S. Sholl y J. A. Steckel, Density Functional Theory.

Programas avanzados a utilizar: VMD, VESTA, LAMMPS, Quantum ESPRESSO, pythTB.

Complementaria (relevante para proyectos)

1. G. Gutiérrez, et al. Computer simulation study of amorphous compounds: structural and vibrational properties, Journal of Materials Science 45, 5124–5134 (2010)

2. M. Sepúlveda-Macías et al. Onset of plasticity and its relation to atomic structure in CuZr metallic glass nanowire: a molecular dynamics study. *J. Alloys Compounds* 655, 357-363 (2016).
3. Q.X.Pei, Y.W.Zhanga, V.B.Shenoy, A molecular dynamics study of the mechanical properties of hydrogen functionalized graphene, *Carbon* 48, 898-904 (2010)
4. A. Walsh et al, Kesterite Thin-Film Solar Cells: Advances in Materials Modelling of Cu₂ZnSnS₄, *Adv. Energy Mater.* 2012, 2, 400–409
5. J.C. Conesa, Modeling with Hybrid Density Functional Theory the Electronic Band Alignment at the Zinc Oxide–Anatase Interface, *J. Phys. Chem. C* 116, 18884-18890 (2012).
6. Z. Zhu and D. Tomanek. Semiconducting layered blue phosphorus: A computational study. *Phys. Rev. Lett.* 112, 176802 (2014).
7. Y. Jing, X. Zhang, and Z. Zhou. Phosphorene: what can we know from computations? *Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science*, 6, 5–19 (2016).
8. J. K. Asboth et al. A Short Course on Topological Insulators. arXiv:1509.02295 Lecture Notes in Physics, 919 (2016). DOI: 10.1007/978-3-319-25607-8
9. P. Fuentealba and C. Cardenas, in *Chemical Modelling: Volume 11*, edited by J.-O. J. Michael Springborg (The Royal Society of Chemistry, 2015), Vol. 11, pp. 151-174.
10. B. Silvi and A. Savin, *Nature* **371** (6499), 683-686 (1994).

Proyectos propuestos

- 1) Vidrio metálico de cobre: determinación estructural.
- 2) Grafeno: propiedades vibracionales.
- 3) Fosforeno: propiedades electrónicas y ópticas.
- 4) Interface entre un absorbente solar y capa transportadora de electrones o huecos.
- 5) Kesteritas para energía solar: propiedades estructurales, electrónicas y vibracionales.
- 6) Efecto Hall cuántico.
- 7) Efecto spin-Hall.
- 8) Caracterización del enlace químico en compuestos con enlaces exóticos
- 9) Función de localización electrónica en un modelo de Hückel.
- 10) Otros.

Horario:

Tres horas semanales de clase presencial. Las horas y salas de clases se definirán en una reunión al inicio del curso.

Organización:

Se ruega comunicar interés mediante un mensaje al e-mail emenendez@uchile.cl

Se hará una reunión para definir el horario el día 12.03.2018 a las 13:40 en el Dpto de Física.