



FACULTAD DE CIENCIAS

CURSO DE POSTGRADO

Nombre del curso	Estructura electrónica de la materia
Tipo de curso (Obligatorio, Electivo, Seminario)	electivo
Nº de horas totales (Presenciales + No presenciales)	46 presenciales 138 no presenciales
Nº de Créditos	6
Fecha de Inicio – Término	14 de Marzo a 20 de Julio
Días / Horario	Martes y Jueves 12:00-13:30
Lugar donde se imparte	Departamento de Física, Facultad de Ciencias
Profesor Coordinador del curso	Patricio Fuentealba
Profesores Colaboradores o Invitados	Carlos Cardenas
Descripción del curso	El curso es una suerte de introducción a la fisico química teórica donde el objetivo es entregar las herramientas necesarias para el análisis y estudio de la estructura electrónica de átomos, moléculas, clusters, nanoestructuras y sólidos
Objetivos	El alumno debe salir preparado para leer un paper del area y usar con sabiduría los softwares correspondientes
Contenidos	<ol style="list-style-type: none">1. Introducción Conceptos básicos de Mecánica Cuántica Gas de electrones libres Átomo de Hidrógeno Tabla Periódica2. Moléculas diatómicas Homonucleares Heteronucleares Orbitales Moleculares Orbitales Híbridos Moléculas exóticas3. Conceptos útiles Electronegatividad Energía y orden de enlace Enlaces $\int, \square, \text{TM} \dots$4. Desde lo finito a lo infinito Teorema de Bloch Sistemas periódicos en una dimensión Generalización a más dimensiones5. Teoría Cuantitativa Moderna Método de Hartree-Fock y correcciones Método de Kohn y Sham y avances Pseudopotenciales6. Tópicos

Modalidad de evaluación	Tareas
Bibliografía	Szabo, Modern Quantum Chemistry A. Sutton, Electronic Structure of Matter J. Kohanoff, Electronic Structure Calculations for Solids and Molecules I. Levine, Quantum Chemistry