F 83
31

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

DEPARTAMENTO : de Física

ASIGNATURA: TEORIA DE SOLIDOS: ELECTRONES.

CARRERA: Doctorado en Física

ORIENTACION:
PLAN:

CARACTER: Optativo

DURACION DE LA MATERIA: 3(tres) meses

HORAS DE CLASE: a) Teóricas: 3 hs. b) Problemas: ——— hs. Prácticas: 4hs.
c) Laboratorio:---- hs. d) Seminarios: hs.
e) Totales: 7 hs.

PROGRAMA

Capítulo 1: Elementos indispensables de teoría de sólidos.
Teorema de Bloch, red recíproca, zonas de Brillouin, masa efectiva, densidad de estados, superficies de Fermi. Caso especial del electrón libre.

Capítulo 2 : Métodos de cálculo clásicos.
Desarrollos en ondas planas, ondas planas ortogonalizadas, pseudopotenciales, ondas planas aumentadas, tight-binding, ecuaciones de Hartree-Fock autoconsistentes.

Capítulo 3: Métodos de cálculo más potentes y de uso más reciente.
Método de la funcional densidad, aproximación de densidad local, método de scattering KKB(Kohn, Korring, Rostocker), métodos lineales LMTO, LMTO-ASA,LAPW, método de recurrencia y densidades locales de estados, clusters atómicos en teoría de sólidos.

Capítulo 4: Aplicaciones
Metales simples, nobles, de transición, cristales covalentes, grafito aleaciones ordenadas o desordenadas, amorfos, superredes, etc. Se eligirán de acuerdo a las posibilidades de computación y a los intereses de los alumnos inscriptos.

Se intentará estudiar las diferencias entre elementos o compuestos químicos semejantes las propiedades específicas de sistemas complejos (laminares, desordenados, inconmesurados, por ejemplo) y alguno fenómenos particulares asociados a defectos, catálisis, magnetismo. etc.

Trabajos Prácticos: Cada estudiante deberá terminar el curso pudiendo manejar algún método de cálculo en forma ágil y conociendo la esencia de varios otros, como para poder acceder fácilmente a su uso.

BIBLIOGRAFIA

- Callaway "Energy band theory" Academic Press(1964)
- Phariseau & Temmerman "The electronic structure of complex systems" Plenum (1983).

Firma del Profesor: Weiss
Aclaración de Firma: Dra. Mariana Weissmann 11 ABR. 1989

Firma del Director: Plans
Dr. RUBEN H. CONTRERAS
DIRECTOR INTERINO
DEPARTAMENTO DE FISICA

Aprobado por Resolución CD 749/89