

Simulación Computacional de Materiales

Curso optativo de postgrado

Profesores: Francisco Muñoz (fvmunoz@gmail.com, coordinador), Eduardo Menéndez y Gonzalo Gutierrez.

Créditos transferibles: 6

Requisitos: Mecánica cuántica 1, Programación avanzada y mecánica estadística.

Objetivo: Entregar al estudiante una visión general de la simulación de materiales a nivel atómico, mediante el uso práctico de métodos computacionales. Elementos básicos de la teoría subyacente, así como de Física de Sólidos serán entregados durante el curso.

Horario: 2 módulos por semana. Martes a las 14:15 y 18:00

Contenido:

- Tight-Binding y orbitales atomicos.
- Teoría Funcional de la Densidad.
- Simulación Dinámica Molecular.

Evaluación: Tareas más un proyecto de investigación en los tópicos tratados.