



UNIVERSIDAD DE EXTREMADURA

FACULTAD DE CIENCIAS

ANEXO 1 PROPUESTA DE TRABAJO FIN DE GRADO

-DEPARTAMENTO DE LA UEX RESPONSABLE DE LA OFERTA: Física

-TÍTULO DEL TRABAJO: Estudio numérico de la estructura y dinámica electrónica en sólidos.

- CARACTERÍSTICAS DEL TRABAJO FIN DE GRADO

-Tipo de trabajo (señalar con una cruz el que proceda):

Teórico	X	Revisión e investigación bibliográfica	Numérico	X
Proyectos de ingeniería		Proyectos de diseño industrial	Informes	
Computacional	X	Experimental	Otros (especificar)	

-Descripción del trabajo (objetivos, metodología...)

En la asignatura "Física del Estado Sólido" del Grado en Física, los alumnos reciben formación acerca de la estructura de bandas de los sólidos y algunas nociones sobre la dinámica de electrones en metales. Con este trabajo se pretende profundizar de forma realista en estos aspectos, haciendo uso de la programación numérica a algunos problemas concretos:

- 1) Dispersión de electrones en una red lineal.
- 2) Bandas de energía en un cristal monodimensional.
- 3) Aplicación de las metodologías LCAO y APW al cálculo de bandas de energía.
- 4) Cálculo de bandas de energía en el modelo de Krönig-Penney.
- 5) Cálculo de la densidad de estados electrónicos en el aluminio.
- 6) Cálculo de la densidad de estados en un modelo de enlace fuerte.
- 7) Cálculo de la estructura electrónica en un potencial de Mathieu mediante métodos variacionales.
- 8) Caracterización de estados electrónicos superficiales.
- 9) Aplicación de potenciales no locales.
- 10) Estructura de bandas de una aleación desordenada.

Para llevar a cabo estas tareas, el alumno deberá escribir un código original (preferiblemente en lenguaje C++), que se adjuntará a la memoria del proyecto. También deberá realizar, para cada problema, una breve introducción teórica en la que se indique el origen del problema, su fundamento teórico y la estrategia de resolución propuesta. Por último, deberá presentar razonada y críticamente los resultados obtenidos.

Observaciones:

Se recomienda a los alumnos haber cursado las asignaturas “Física del Estado Sólido” y “Ampliación de Física del Estado Sólido”
Este Trabajo Fin de Grado sólo podrá ser realizado por un alumno.

-TUTORES:

Nombre: Juan José Meléndez Martínez

Área de conocimiento: Física de la Materia Condensada

Fecha de aprobación del Consejo del Departamento: 7 de noviembre de 2012

Vº Bº y Firma del Director del Dpto.



Juan J. Meléndez Martínez

Vº Bº y Firma del Tutor

