



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID

## 31248 - SÓLIDOS

### Información de la asignatura

**Código - Nombre:** 31248 - SÓLIDOS

**Titulación:** 616 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2013)  
651 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional  
748 - Máster Erasmus Mundus en Química Teórica y Modelización Computacional  
751 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional Europeo  
762 - Máster en Química Teórica y Modelización Computacional (2021)

**Centro:** 104 - Facultad de Ciencias

**Curso Académico:** 2024/25

### 1. Detalles de la asignatura

#### 1.1. Materia

Sólidos.

#### 1.2. Carácter

Optativa

#### 1.3. Nivel

Máster (MECES 3)

#### 1.4. Curso

1

#### 1.5. Semestre

Anual

#### 1.6. Número de créditos ECTS

5.0

#### 1.7. Idioma

English

#### 1.8. Requisitos previos

No hay.

#### 1.9. Recomendaciones

No Hay

#### 1.10. Requisitos mínimos de asistencia

<b>Código Seguro de Verificación:</b>		<b>Fecha:</b>	08/07/2024	1/5
<b>Firmado por:</b>	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
<b>Url de Verificación:</b>		<b>Página:</b>	1/5	

La asistencia a las clases es obligatoria.

### 1.11. Coordinador/a de la asignatura

Antonio Márquez Cruz - Universidad de Sevilla

<https://autoservicio.uam.es/paginas-blancas/>

### 1.12. Competencias y resultados del aprendizaje

#### 1.12.1. Competencias / Resultados del proceso de formación y aprendizaje

##### BÁSICAS Y GENERALES

CB6 - Poseer y comprender conocimientos que aporten una base u oportunidad de ser originales en el desarrollo y/o aplicación de ideas, a menudo en un contexto de investigación.

CB7 - Que los estudiantes sepan aplicar los conocimientos adquiridos y su capacidad de resolución de problemas en entornos nuevos o poco conocidos dentro de contextos más amplios (o multidisciplinares) relacionados con su área de estudio.

CB9 - Que los estudiantes sepan comunicar sus conclusiones y los conocimientos y razones últimas que las sustentan a públicos especializados y no especializados de un modo claro y sin ambigüedades.

CB10 - Que los estudiantes posean las habilidades de aprendizaje que les permitan continuar estudiando de un modo que habrá de ser en gran medida autodirigido o autónomo.

CG01 - Los estudiantes son capaces de fomentar, en contextos académicos y profesionales, el avance tecnológico y científico dentro de una sociedad basada en el conocimiento y en el respeto a: a) los derechos fundamentales y de igualdad de oportunidades entre hombres y mujeres, b) los principios de igualdad de oportunidades y accesibilidad universal de las personas con discapacidad y c) los valores propios de una cultura de paz y de valores democráticos.

CG04 - Los estudiantes desarrollan un pensamiento y razonamiento crítico y saben comunicarlos de manera igualitaria y no sexista tanto en forma oral como escrita, en su lengua propia y en una lengua extranjera.

##### TRANSVERSALES:

CT03 - El/la estudiante posee capacidad de análisis y síntesis de tal forma que pueda comprender, interpretar y evaluar la información relevante asumiendo con responsabilidad su propio aprendizaje o, en el futuro, la identificación de salidas profesionales y yacimientos de empleo.

##### ESPECÍFICAS

CE03 - Adquiere una visión global de las distintas aplicaciones de la Química Teórica y modelización en campos de la Química, Bioquímica, Ciencias de Materiales, Astrofísica y Catálisis.

CE04 - Comprende los fundamentos teóricos y prácticos de técnicas computacionales con las que puede analizar la estructura electrónica, morfológica y estructural de un compuesto e interpreta adecuadamente los resultados.

CE28 - Proporcionar la metodología básica para el tratamiento de sistemas periódicos, cristales y polímeros.

#### 1.12.2. Resultados de aprendizaje

Proporcionar al alumno la metodología básica para el tratamiento en sistemas condensados periódicos puros y con defectos de los siguientes aspectos: Cristalografía; Estructura electrónica; Termodinámica; Transiciones de fase; Superficies; Catálisis heterogénea; Propiedades ópticas en materia condensada; Magnetismo.

En el curso los estudiantes recibirán una introducción intensiva a la modelización y tratamiento de estos problemas en el estado sólido.

#### 1.12.3. Objetivos de la asignatura

-

### 1.13. Contenidos del programa

#### 1. CRISTALOGRAFÍA

1.1 Simetría en cristales.

1.2 Espacio recíproco

#### 2. ESTRUCTURA ELECTRÓNICA

2.1 Modelos de clúster y modelos periódicos

2.2 Metodologías de cálculo

<b>Código Seguro de Verificación:</b>		<b>Fecha:</b>	08/07/2024	2/5
<b>Firmado por:</b>	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
<b>Url de Verificación:</b>		<b>Página:</b>	2/5	

### 3. TERMODINÁMICA

- 3.1 Aproximación estática y modelos térmicos
- 3.2 Transiciones de fase

### 4. ENLACE QUÍMICO

- 4.1 Topologías inducidas por campos escalares en cristales
- 4.2 Caracterización del enlace químico en sólidos y relación con propiedades macroscópicas

### 5. CÁLCULOS AB INITIO DE ESTRUCTURA ELECTRÓNICA EN SÓLIDOS

- 5.1 Comparación de métodos basados en la función de onda y en el funcional de la densidad
- 5.2 De las bases de datos cristalográficas a los cálculos de estructura electrónica

### 6. PROPIEDADES TERMODINÁMICAS DE SÓLIDOS CRISTALINOS

- 6.1 Curva E(V) y modelo estático
- 6.2 Fonones en cristales

### 7. SIMULACIÓN AB INITIO DE LA ESTRUCTURA, PROPIEDADES TERMODINÁMICAS Y REACTIVIDAD EN SUPERFICIES

- 8.1 Modelos de cluster y modelos periódicos
- 8.2 Estructura de superficies. Reconstrucción.
- 8.3 Adsorción y reactividad en superficies

### 8. PROPIEDADES ÓPTICAS

- 8.1 Química cuántica y las ecuaciones de Maxwell macroscópicas
- 8.2 Aplicaciones

### 9. ELEMENTOS DE MAGNETISMO MOLECULAR Y CRISTALINO

- 9.1 Hamiltonianos modelo y efectivos
- 9.2 Aplicaciones

#### 1.14. Referencias de consulta

- [01] L. Kantorovich, "Quantum Theory of the Solid State" (Kluwer, Dordrecht, The Netherlands, 2004).
- [02] R. M. Martin, "Electronic Structure: Basic theory and practical methods" (Cambridge UP, Cambridge, UK, 2004).
- [03] E. Kaxiras, "Atomic and Electronic Structure of Solids" (Cambridge UP, Cambridge, UK, 2003).
- [04] O. Anderson, "Equations of State for Solids in Geophysics and Ceramic Science" (Oxford UP, Oxford, UK, 1995).
- [05] A. Otero-de-la-Roza and V. Luaña, "Equations of state and thermodynamics of solids using empirical corrections in the quasiharmonic approximation", Phys. Rev. B 84 (2011) 024109.
- [06] A. R. Oganov, Ed, "Modern methods of crystal structure prediction" (Wiley-VCH, 2011).
- [07] J. P. Poirier, "Introduction to the Physics of the Earth's Interior" (Cambridge UP, Cambridge, UK, 2000).
- [08] B. Bersuker, "The Jahn-Teller effect" (Cambridge UP, Cambridge, UK, 2006).
- [09] E. R. Johnson, S. Keinan, P. Mori-Sanchez, J. Contreras-Garcia, A. J. Cohen, and W. Yang, "Revealing Noncovalent Interactions", J. Am. Chem. Soc. 132, 6498 (2010)
- [10] B. Silvi, A. Savin, "Classification of chemical bonds based on the topological analysis of electron localization functions", Nature 371, 683 (1994)
- [11] J. Contreras-Garcia, A. M. Pendas, B. Silvi, J. M. Recio, "Computation of local and global properties of the ELF topology in crystals", J. Theor. Chem. Comp. 113, 1068 (2009)
- [12] A. Otero-de-la-Roza, J. Contreras-Garcia, E. R. Johnson, "Revealing non-covalent interactions in solids, NCI plots revisited" Phys. Chem. Chem. Phys. 14, 12165 (2012)
- [13] P. García-Fernández, J. Wojdel, J. Iñiguez and J. Junquera "Second-principles method for materials simulations including electron and lattice degrees of freedom" Phys. Rev. B 93, 195137 (2016)
- [14] M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, A. Jorio "Group Theory: Applications to the Physics of Condensed Matter" (Springer,

<b>Código Seguro de Verificación:</b>		<b>Fecha:</b>	08/07/2024	3/5
<b>Firmado por:</b>	Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas			
<b>Url de Verificación:</b>		<b>Página:</b>	3/5	

2007)

[15] J.L. Whitten and H. Yang, "Theory of Chemisorption and reactions on metal surfaces" Surf. Sci. rep. 24, 59 (1996)

[16] A. R. Leach, "Molecular modeling" (Prentice Hall, 2001).

[17] T. Schlick, "Molecular modeling and simulation" (Springer, 2002).

[18] D. Marx and J. Hutter, "Ab initio molecular dynamics: Theory and implementation", in "Modern methods and algorithms on quantum chemistry" by J. Grotendorst (Ed.), (John von Neumann Institute, NIC series vol. 1 & 3, 2000).

[19] C. Fiolhais, F. Nogueira and M. A. L. Marques, Eds. "A Primer in Density Functional Theory", (Springer, Heidelberg, 2003).

[20] R. Dronskowski "Computational Chemistry of Solid State Materials" (Wiley-VCH, 2005).

[21] P. Huang, and E. A. Carter, "Advances in Correlated Electronic Structure Methods for Solids, Surfaces and Nanostructures", Ann. Rev. Phys. Chem. 59 (2008) 261.

[22] G. Pacchioni, A. M. Ferrari, A. M. Márquez, and F. Illas, "Importance of Madelung Potential in Quantum Chemical Modeling of Ionic Surfaces", J. Comput. Chem. 18 (1997) 617.

[23] J. N. Norskov, F. Abild-Pedersen, F. Studt, and T. Bligaard "Density functional theory in surface chemistry and catalysis" PNAS 108 (2011) 937-943.

[24] F. Yang, J. Graciani, J. Evans, P. Liu, J. Hrbek, J. Fernández. Sanz, and J. A. Rodríguez, "CO oxidation on inverse CeOx/Cu(111) Catalysts: High catalytic activity and ceria-promoted dissociation of O2", J. Am. Chem. Soc. 133 (2011) 3444.

[25] C. de Graaf, R. Broer, "Magnetic Interactions in Molecules and Solids" Second volume of the textbooks of the TCCM Master. (Springer 2015).

[26] J. P. Malrieu, R. Caballol, C. J. Calzado, C. de Graaf, N. Guihéry "Magnetic Interactions in Molecules and Highly Correlated Materials: Physical Content, Analytical Derivation, and Rigorous Extraction of Magnetic Hamiltonians", Chemical Reviews 114, 429-492 (2014)

## 2. Metodologías docentes y tiempo de trabajo del estudiante

### 2.1. Presencialidad

	#horas
Porcentaje de actividades presenciales (mínimo 33% del total)	40
Porcentaje de actividades no presenciales	75

### 2.2. Relación de actividades formativas

Actividades presenciales	Nº horas
Clases teóricas en aula	40
Seminarios	
Clases prácticas en aula	
Prácticas clínicas	
Prácticas con medios informáticos	
Prácticas de campo	
Prácticas de laboratorio	
Prácticas externas y/o practicum	
Trabajos académicamente dirigidos	
Tutorías	
Actividades de evaluación	
Otras	

**Lección Magistral:** El profesor expondrá los contenidos del curso en sesiones presenciales de dos horas basándose en los materiales docentes publicados en la plataforma Moodle.

**Docencia en red.** Se utilizará las distintas herramientas que ofrece la plataforma Moodle (<https://posgrado.uam.es>).  
Publicación de contenidos de la asignatura, herramientas de trabajo en grupo: foros de discusión y wiki, correo electrónico

**Resolución de ejercicios prácticos:** Problemas numéricos, cuestiones tipo test, interpretación y procesamiento de la información, evaluación de publicaciones científicas, etc.

**Informes o memorias escritas:** Orientación y supervisión en la preparación de informes o memorias escritas.

## 3. Sistemas de evaluación y porcentaje en la calificación final

### 3.1. Convocatoria ordinaria

Los conocimientos adquiridos por el estudiante serán evaluados a lo largo de todo el curso, intentando que el estudiante avance de forma regular y constante en la asimilación de los contenidos de la asignatura.

La nota final de la asignatura se basará en los ejercicios, trabajos y discusión de los mismos que se irá realizando durante el curso. Dichos trabajos se puntuarán en base a los siguientes porcentajes:

Código Seguro de Verificación:		Fecha:	08/07/2024	4/5
Firmado por:	Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas			
Url de Verificación:		Página:	4/5	

- 60% Realización de un examen práctico sobre la teoría y las prácticas de la asignatura.
- 40% Discusión en tutorías y/o seminarios. Este porcentaje estará dividido en un 20% de discusión de ejercicios y un 20% en la realización y discusión de un caso práctico propuesto por uno de los profesores.

### 3.1.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final (máximo 70% de la calificación final o el porcentaje que figure en la memoria)	60
Evaluación continua	40

### 3.2. Convocatoria extraordinaria

Se realizará un examen final único que será de carácter teórico y que abarcará los contenidos de toda la asignatura. La puntuación en la convocatoria extraordinaria se realizará en base a los siguientes porcentajes:

- 70% el examen final,
- 30% la realización de un informe crítico de las prácticas realizadas o de ejercicios relacionados con la asignatura.

### 3.2.1. Relación actividades de evaluación

Actividad de evaluación	%
Examen final (máximo 70% de la calificación final o el porcentaje que figure en la memoria)	70
Evaluación continua	30

### 4. Cronograma orientativo

Por favor, comprobar el horario oficial publicado en la página web del Máster.

<b>Código Seguro de Verificación:</b>		<b>Fecha:</b>	08/07/2024	5/5
<b>Firmado por:</b>	<i>Esta guía docente no estará firmada mediante CSV hasta el cierre de actas</i>			
<b>Url de Verificación:</b>		<b>Página:</b>	5/5	