



Universidad Nacional de Entre Ríos
Facultades de Ingeniería, Ciencias Agropecuarias y
Ciencias de la Alimentación
Oro Verde-Concordia, E. R.
República Argentina

DOCTORADO EN INGENIERÍA

Mención

Carrera: Doctorado en Ingeniería

Curso de Posgrado: *Tópicos de Física y Matemática Aplicadas: Diseño de nanomateriales con teoría cuántica de sólidos*

Carga Horaria ¹: 90 hs.

Docente/s a cargo: Dr. Eduardo A. Albanesi

Colaborador: Ing. Vanessa González Lemus

Semestre: 2^{do}

Año: 2011

Características del curso

1. **Carga horaria:** 90 hs.
2. **Curso teórico:** curso donde se desarrolla en forma expositiva una temática propia de la disciplina:
3. **Curso teórico-práctico:** curso que articula la modalidad del curso teórico con una actividad de la práctica con relación a la temática de estudio. Lo teórico y lo práctico se dan simultáneamente en forma interrelacionada: *Teórico-práctico, con talleres de investigación.*
4. **Carácter:** *Ciclo Electivo*

Programa Analítico de foja: a foja:

Bibliografía de foja: a foja:

Aprobado Resoluciones de Consejos Directivos: **Fecha:**

Modificado/Anulado/ Res. Cs. Ds.: **Fecha:**

Carece de validez sin la certificación del Comité de Doctorado:



Universidad Nacional de Entre Ríos
Facultades de Ingeniería, Ciencias Agropecuarias y
Ciencias de la Alimentación
Oro Verde-Concordia, E. R.
República Argentina

PROGRAMA ANALÍTICO

Unidad 1

Revisión de manejo general de sistemas Unix, comandos más usuales. Aplicaciones a la operación y procesamiento gráfico de resultados. Estructura cristalina, espacio real y recíproco. Aplicaciones a cristales cúbicos y romboédricos. Bandas de energía tridimensional. Índices de Miller.

Unidad 2

Ejercitación FLAPW, DOS y bandas de AlF₃ romboédrico. Método de pseudo-potenciales, ejercitación. Cálculo de bandas de energía y densidades de estados de AlF₃ romboédrico. Ejercitación en ZnO wurtzita, y grafeno. Optimización volumétrica. Sistemas no-periódicos. Diseño de interfases semiconductoras ZnO/SiO₂, Zn₂SiO₄/Si(100) y metal-aislador Cu/AlF₃.

Unidad 3

Teoría de la funcional densidad, cálculos de energía total. Diferentes aproximaciones de intercambio y correlación. Teoría de propiedades elásticas. Teoría de la piezoelectricidad. Modelo electromecánico y aplicaciones en el diseño de micro- y nano-dispositivos electromecánicos.

Unidad 4

Excitaciones elementales. Interacciones de muchos cuerpos 1): corrección *many-body* electrón-electrón: teoría GW. Cálculo de las correcciones GW para PbI₂, AlF₃, ZnO, e interfases diseñadas. Interacciones de muchos cuerpos 2): corrección *many-body* electrón-hueco: teoría BSE, excitones. Su influencia en las transiciones interbandas.



Universidad Nacional de Entre Ríos
Facultades de Ingeniería, Ciencias Agropecuarias y
Ciencias de la Alimentación
Oro Verde-Concordia, E. R.
República Argentina

BIBLIOGRAFIA

1. D. Gilly, *UNIX in a nutshell*, O'Reilly & Associates, Inc., 1998.
2. N. Ashcroft and D. Mermin, *Solid State Physics*, Holt, Rinehart and Winston, 1976.
3. D. Neamen, *Semiconductor Physics and Devices*, Irwin, 1992.
4. J.M. Ziman, *Theory of Solids*, Cambridge, 1992.
5. G. Onida, L. Reining, A. Rubio, *Rev. Mod. Phys.* 74, (2002), 601-59.
6. S. Baroni, S. de Gironcoli, A. Dal Corso, P. Giannozzi, *Rev. Mod. Phys.* 73, (2001), 515-62.
7. P. Blaha, K. Schwarz, P. Sorantin and S. B. Rickey, 1990. *Comp. Phys. Commun.*, vol. 59, 399.
8. S.D. Senturia, *Microsystem Design*, Kluwer Pub. N.Y., 2001.
9. W. Guo, S. Wei, X. Lu, and L. Wang, *Bull. Korean Chem. Soc.* 2010, Vol. 31, 3693.
10. R.G. Singh, F. Singh, D. Kanjilal, V. Agarwal and R.M. Mehra, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 42 (2009), 062002.
11. C. Li, Z. Liang, H. Xiao, Y. Wu, Y. Liu, *Materials Letters* 64 (2010) 1972–72.
12. S. Zh. Karazhanov, P. Ravindran, H. Fjellvåg, and B. G. Svensson, *J. of Appl. Phys.*, 106, (2009), 123701.
13. S. Schintke, S. Messerli, M. Pivetta, F. Patthey, L. Libioulle, M. Stengel, A. De Vita, and W.-D. Schneider, *Phys. Rev. Lett.* 87, (2001), 276801-1.
14. Y.-R. Chen, V. Perebeinos, and P. B. Allen, *Phys. Rev. B* 69, (2004), 054109.
15. A. K. Geim, *Science* 324, (2009), 1530.



Universidad Nacional de Entre Ríos
Facultades de Ingeniería, Ciencias Agropecuarias y
Ciencias de la Alimentación
Oro Verde-Concordia, E. R.
República Argentina

PLANIFICACIÓN DEL CURSO

Objetivos Generales: Revisión de manejo general de sistemas Unix, comandos más usuales. Aplicaciones a la operación y procesamiento gráfico de resultados. Estructura cristalina, espacio real y recíproco. Aplicaciones a cristales cúbicos y romboédricos. Teoría de la funcional densidad, y calculos de energía total. Diferentes aproximaciones de intercambio y correlación. Sistemas no-periódicos. Diseño de interfases semiconductoras y metal-aislador. Excitaciones elementales. Interacciones de muchos cuerpos electrón-electrón y electrón-hueco, su influencia en las transiciones inter-bandas. Elementos de elasticidad y piezoelectricidad en nano-sistemas. Aplicaciones en el diseño de micro- y nano-dispositivos electromecánicos.

Objetivos Particulares:

-Profundizar los cursos de postgrado anteriores dictados por el grupo. Especialmente se requiere haber aprobado o poseer formación equivalente de los cursos:

- *Teoría de materiales y sus propiedades ópticas, y*
- *Modelos Computacionales de Materiales Ordenados,*

Metodología de Trabajo: 90 hs. totales; 48 hs. presenciales obligatorias; 42 hs. de ejercitación con tareas de campo/hogar. Curso teórico-práctico, con talleres de investigación

Equipo docente:

Docente responsable: Dr. Eduardo A. Albanesi

Colaborador: Ing. Vanessa González Lemus

Cronograma del Curso: 90 hs. totales; 48 hs. presenciales; 42 hs. de ejercitación con tareas de campo/hogar.

Viernes de 14:30 hs.- 18:30 hs.

1^{er}. Encuentro: viernes 19/08 de 14:30 a 18:30 hs.

2^{do}. Encuentro: viernes 26/08 de 14:30 a 18:30 hs.

3^{er}. Encuentro: viernes 02/09 de 14:30 a 18:30 hs.

4^{to}. Encuentro: viernes 09/09 de 14:30 a 18:30 hs.

5^{to}. Encuentro: viernes 16/09 de 14:30 a 18:30 hs.

6^{to}. Encuentro: viernes 23/09 de 14:30 a 18:30 hs.

7^{mo}. Encuentro: viernes 30/09 de 14:30 a 18:30 hs.

8^{vo}. Encuentro: viernes 7/10 de 14:30 a 18:30 hs.

9^{no}. Encuentro: viernes 14/10 de 14:30 a 18:30 hs.

10^{mo}. Encuentro: viernes 21/10 de 14:30 a 18:30 hs.

11^{vo}. Encuentro: viernes 28/10 de 14:30 a 18:30 hs.

12^{vo}. Encuentro: viernes 04/11 de 14:30 a 18:30 hs.

Condiciones de Regularidad y Promoción:

Se asignarán temas a resolver y exponer frente al curso para su discusión.

Infraestructura necesaria: