



Asignatura: Sólidos  
Código: 31248  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Optativa  
Nº de créditos: 5 ECTS

## 1. ASIGNATURA / **COURSE TITLE**

Sólidos / [Solids](#)

### 1.1. Código / **Course number**

31248

### 1.2. Materia / **Content area**

Módulo 3. Optatividad / [Module 3. Optional courses](#)

### 1.3. Tipo / **Course type**

Optativa / [Elective subject](#)

### 1.4. Nivel / **Course level**

Máster / [Master](#)

### 1.5. Curso / **Year**

1º / [1<sup>st</sup>](#)

### 1.6. Semestre / **Semester**

Anual / [Anual](#)

### 1.7. Número de créditos / **Credit allotment**

5 créditos ECTS / [5 ECTS credits](#)

### 1.8. Requisitos previos / **Prerequisites**

No hay requisitos previos / [There are no previous prerequisites](#)

### 1.9. Requisitos mínimos de asistencia a las sesiones presenciales / **Minimum attendance requirement**

La asistencia a las clases es obligatoria / [Attendance is mandatory](#)



Asignatura: Sólidos  
Código: 31248  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Optativa  
Nº de créditos: 5 ECTS

## 1.10. Datos del equipo docente / Faculty data

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Antonio M. Márquez Cruz (Coordinador / **Coordinator**)  
Departamento de Química Física / **Department of Physical Chemistry**  
Universidad de Sevilla / **University of Sevilla**  
Correo electrónico/**Email**: [marquez@us.es](mailto:marquez@us.es)  
Página web/**Website**: <http://personal.us.es/marquez>  
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: Contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Pablo García Fernández  
Departamento de Ciencias de la Tierra y Física de la Materia Condensada/  
**Department of Earth Sciences and Physics of Condensed Matter**  
Universidad de Cantabria / **University of Cantabria**  
Correo electrónico/**Email**: [garciapa@unican.es](mailto:garciapa@unican.es)  
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: Contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Cristina Díaz Blanco  
Departamento de Química / **Department of Chemistry**  
Universidad Autónoma de Madrid  
Correo electrónico/**Email**: [cristina.diaz@uam.es](mailto:cristina.diaz@uam.es)  
Página web/**Website**: <http://web.uam.es/departamentos/ciencias/quimica/cristina/>  
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: Contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Julia Contreras García  
Departamento de Química Teórica / **Department of theoretical chemistry**  
Universidad Pierre et Marie Curie / **University Pierre et Marie Curie**  
Correo electrónico/**Email**: [julia.contreras.garcia@gmail.com](mailto:julia.contreras.garcia@gmail.com)  
Página web/**Website**: <http://www.lct.jussieu.fr/pagesperso/contrera/>  
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: Contact by email

Docente(s) / **Lecturer(s)**: Coen de Graaf  
Departamento de Química Física e Inorgánica/ **Department of Physical and Inorganic Chemistry**  
Universidad Rovira i Virgili / **Rovira and Virgili University (Tarragona, Spain)**  
Correo electrónico/**Email**: [coen.degraaf@urv.cat](mailto:coen.degraaf@urv.cat)  
Página web/**Website**: <https://www.icrea.cat/Web/ScientificStaff/coen-de-graaf-367>  
<http://www.quimica.urv.es/~w3qf/>  
Horario de atención al alumnado/**Office hours**: Contact by email

## 1.11. Objetivos del curso / Course objectives

### 1.11a. Resultados del 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;



Asignatura: Sólidos  
Código: 31248  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Optativa  
Nº de créditos: 5 ECTS

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.

#### 1.11b. Competencias

Estos resultados del aprendizaje contribuyen a la adquisición de las siguientes competencias del curso:

#### **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.



Asignatura: Sólidos  
Código: 31248  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Optativa  
Nº de créditos: 5 ECTS

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.

### 1.11a. Learning objectives

To provide to the students the basic methodology to treat pure and defective periodic systems of condensed matter dealing with the following topics: Crystallography; Electronic structure; Thermodynamics; Phase transitions; Surfaces; Heterogeneous catalysis; Optical properties in condensed matter; Magnetism. In the course the students will receive an intensive introduction to the modelization and treatment of all these issues in solids.

### 1.11b. Skills

These learning objectives contribute to provide the following skills for the students:

#### **BASIC AND GENERAL SKILLS**

CB6 - Students possess and understand knowledge that provides a basis or opportunity to be original in the development and/or application of ideas, often in a research context.

CB7 - Students know how to apply the acquired knowledge and their problem solving capacity in new or little known environments within broader (or multidisciplinary) contexts related to their area of study.

CB9 - Students know how to communicate their conclusions and the knowledge and reasons that support them to specialized and non-specialized audiences in a clear and unambiguous way.

CB10 - Students possess the learning skills that allow them to continue studying in a way that will be self-directed or autonomous.

CG01 - Students are able to foster, in academic and professional contexts, technological and scientific progress within a society based on knowledge and respect for: a) fundamental rights and equal opportunities between men and women, b) The principles of equal opportunities and universal accessibility for persons with disabilities, and c) the values of a culture of peace and democratic values.

CG04 - Students develop a critical thinking and reasoning and know how to communicate them in an egalitarian and non-sexist way both in oral and written form, in their own language and in a foreign language.



Asignatura: Sólidos  
Código: 31248  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Optativa  
Nº de créditos: 5 ECTS

### CROSS-COMPREHENSIVE SKILLS

CT03 - Students have the ability of analyze and synthesize in such a way that they can understand, interpret and evaluate the relevant information by assuming with responsibility their own learning or, in the future, the identification of professional exits and employment fields.

### SPECIFIC SKILLS

CE03 - Students acquire an overview of the different applications of the Theoretical Chemistry and modeling in the fields of Chemistry, Biochemistry, Materials Sciences, Astrophysics and Catalysis.

CE04 - Students understand the theoretical and practical bases of computational techniques with which they can analyze the electronic, morphological and structural structure of a compound and interpret the results adequately.

CE28 - Provide basic methodology for the treatment of periodic systems, crystals and polymers.

## 1.12. Contenidos del programa / Course contents

### 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

### 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



Asignatura: Sólidos  
Código: 31248  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Optativa  
Nº de créditos: 5 ECTS

## **7. SIMULACIÓN AB INITIO DE LA ESTRUCTURA, PROPIEDADES TERMODINAMICAS 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 macrocópicas
- 8.2 Aplicaciones

## **9. ELEMENTOS DE MAGNETISMO MOLECULAR Y CRISTALINO**

- 10.1 Hamiltonianos modelo y efectivos
- 10.2 Aplicaciones

## **1. CRYSTALLOGRAPHY**

- 1.1 Symmetry in crystals
- 1.2 Reciprocal space

## **2. ELECTRONIC STRUCTURE**

- 2.1 Cluster and periodic models
- 2.2 Computational methodologies

## **3. THERMODYNAMICS**

- 3.1 Static approximation and thermal models
- 3.2 Phase transitions

## **4. CHEMICAL BONDING**

- 4.1 Scalar field induced topologies in crystals
- 4.2 Characterization of chemical bonding in solids and relationship to macroscopic properties

## **5. AB INITIO ELECTRONIC STRUCTURE CALCULATIONS IN SOLIDS**

- 5.1 Comparison of wave function and density functional methods
- 5.2 From crystallographic data basis to electronic structure calculations

## **6. THERMODYNAMIC PROPERTIES OF CRYSTALLINE SOLIDS**

- 6.1 E(V) curves and the static model
- 6.2 Phonons in crystals

## **7. AB INITIO SIMULATIONS OF STRUCTURAL, THERMODYNAMIC PROPERTIES AND REACTIVITY IN SURFACES**

- 8.1 Cluster and periodic models
- 8.3 Surface structure and reconstruction
- 8.2 Adsorption and reactivity in surfaces

## **8. OPTICAL PROPERTIES**

- 8.1 Quantum chemistry and the macroscopic Maxwell equations



Asignatura: Sólidos  
 Código: 31248  
 Centro: Facultad de Ciencias  
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
 Nivel: Máster  
 Tipo: Formación Optativa  
 Nº de créditos: 5 ECTS

## 8.2 Applications

## 9. ELEMENTS OF MOLECULAR AND CRYSTALLINE MAGNETISM

### 9.1 Model and effective hamiltonians

### 9.2 Applications

## 1.13. Referencias de consulta / Course bibliography

- [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, 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).



Asignatura: Sólidos  
 Código: 31248  
 Centro: Facultad de Ciencias  
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
 Nivel: Máster  
 Tipo: Formación Optativa  
 Nº de créditos: 5 ECTS

- [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 CeO<sub>x</sub>/Cu(111) Catalysts: High catalytic activity and ceria-promoted dissociation of O<sub>2</sub>", 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. Métodos docentes / Teaching methodology

**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.





Asignatura: Sólidos  
 Código: 31248  
 Centro: Facultad de Ciencias  
 Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
 Nivel: Máster  
 Tipo: Formación Optativa  
 Nº de créditos: 5 ECTS

**Lecture:** The Professor will deliver lectures about the theoretical contents of the course during two-hour sessions. The presentations will be based on the different materials available at the Moodle platform.

**Network teaching:** All the tools available at the Moodle website (<https://posgrado.uam.es>) will be used (uploading of teaching materials, utilization of work team strategies, wiki, blogs, e-mail, etc.).

**Solving practical exercises:** Numerical problems, multiple choice questions, interpretation and information processing, evaluation of scientific publications, etc..

**Written reports:** Orientation and supervision in the preparation of written reports.

### 3. Tiempo de trabajo del estudiante / Student workload

**Presencial:**

Clases teóricas en aula / aula virtual .....50 horas

**No Presencial:**

Estudio autónomo individual o en grupo.....45 horas

Elaboración de una memoria con ejercicios planteados en clase .....30 horas

TOTAL (5 ECTS \* 25 horas/ECTS) .....125 horas

**Contact hours:**

Theoretical lessons in classroom / virtual classroom ..... 50 hours

**Independent study hours:**

self-study or group study .....45 hours

Elaboration of a memory based on the exercises proposed in class .....30 hours

TOTAL (5 ECTS \* 25 hours/ECTS) ..... 125 hours

### 4. Métodos de evaluación y porcentaje en la calificación final / Evaluation procedures and weight of components in the final grade

**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.



Asignatura: Sólidos  
Código: 31248  
Centro: Facultad de Ciencias  
Titulación: Máster en Química Teórica y Modelización Computacional  
Nivel: Máster  
Tipo: Formación Optativa  
Nº de créditos: 5 ECTS

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:

- 60% Realización de un examen práctico sobre la teoría y las prácticas de la asignatura.
- 20% la discusión que sobre la misma se realice con el profesor en tutorías y seminarios.
- 20% la realización de un informe sobre un artículo científico.

#### **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.

#### **Ordinary assessment**

The knowledge acquired by the student will be evaluated along the course. The educational model to follow will emphasize a continuous effort and advance in training and learning.

The final student mark will be based on exercises that must be done during the course. The next criteria will be followed for assessment of student exercises:

- 60% from a practical exam on the course contents and practical session,
- 20% from discussions between the student and professor in tutoring sessions and seminars.
- 20 % from writing an essay based on a scientific paper

#### **Extraordinary assessment**

The student will have to face a final exam, including both theory and practical exercises. The student mark will be obtained from:

- 70% from the final exam,
- 30% from the individual work.

## **5. Cronograma\* / Course calendar**

Por favor, comprobar el horario oficial publicado en la página web del Máster.  
Please, check the official schedule posted on the master website.

\*Este cronograma tiene carácter orientativo

\*This course calendar is orientative