

## **Curso VASP - Impartido por el Dr. Joel Ireta Moreno**

### **PROGRAMA**

1. Introducción a la estructura electrónica de los materiales (átomos, moléculas, sólidos)
2. Breve repaso de los diferentes métodos para calcular la estructura electrónica de los materiales
3. Introducción a la teoría de los funcionales de la densidad
4. Efecto sobre la estructura electrónica de un potencial periódico
5. El concepto de pseudopotencial
6. De pseudopotenciales con conservación de la norma a pseudopotenciales ultrasuaves
7. El método de ondas planas aumentadas con proyectores
8. VASP, ABINIT y otros códigos por el estilo
9. Dinámica molecular a primeros principios.

### Bibliografía

Richard M. Martin  
Electronic Structure Basic Theory and Practical Methods  
Cambridge University Press (Cambridge 2004)