

# ESTRUCTURA ELECTRÓNICA DE LOS SÓLIDOS: EL ARTE DE SUSTITUIR UN PROBLEMA POR OTRO

Juan José Meléndez Martínez

El estudio de la estructura electrónica de los sólidos pasa por resolver la ecuación de Schrödinger con un hamiltoniano complicado. En efecto, éste contiene términos de interacción electrón-electrón y electrón-núcleo, además del término de energía cinética. Si bien el término de interacción electrón-núcleo se puede tratar de forma más o menos amigable en sólidos cristalinos, la parte del león está en el término de interacción mutua. Éste es también el término más interesante, puesto que a él se asocian las propiedades físicas de las fases condensadas que son relevantes a nivel científico y tecnológico.

En este seminario (que, pese a lo que pueda parecer, pretende ser divulgativo y didáctico más que técnico) describo el problema cuántico asociado a la estructura electrónica de los sólidos, y distintos grados de aproximación para tratar el problema de la interacción. En particular, presentaré la teoría de la funcional de densidad (DFT), como la aproximación de orden cero, y la teoría de perturbaciones de muchos cuerpos (*"many-body perturbation theory"*). También presentaré algunos problemas interesantes a los que se han aplicado estas teorías.