



1821 Universidad de Buenos Aires

Resolución Consejo Directivo

Número:

Referencia: EX-2022-05151939- -UBA-DMESA#FCEN Elementos de Química Cuántica sesión 19/09/2022

VISTO:

La nota presentada por la Dirección del Departamento de Química Inorgánica, Analítica y Química Física, mediante la cual eleva la información del curso de posgrado Elementos de Química Cuántica,

CONSIDERANDO:

lo actuado por la Comisión de Doctorado,

lo actuado por la Comisión de Posgrado,

lo actuado por la Comisión de Presupuesto y Administración,

lo actuado por este Cuerpo en la sesión realizada en el día 19 septiembre 2022,

en uso de las atribuciones que le confiere el Artículo 113° del Estatuto Universitario,

**EL CONSEJO DIRECTIVO DE LA FACULTAD
DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES**

R E S U E L V E:

ARTÍCULO 1°: Aprobar el dictado del nuevo curso de posgrado **Elementos de Química Cuántica** de 128 horas de duración, que será dictado por los Dres Daniel Laría y Damián Scherlis.

ARTÍCULO 2°: Aprobar el programa del curso de posgrado **Elementos de Química Cuántica** que como anexo forma parte de la presente Resolución, para su dictado en el segundo cuatrimestre de 2022.

ARTÍCULO 3°: Aprobar un puntaje máximo de cinco (5) puntos para la Carrera del Doctorado.

ARTÍCULO 4°: Establecer que el presente curso no será arancelado (**CATEGORÍA 1**)

ARTÍCULO 5°: Disponer que de no mediar modificaciones en el programa, la carga horaria y el arancel, el presente Curso de Posgrado tendrá una vigencia de cinco (5) años a partir de la fecha de la presente Resolución.

ARTÍCULO 6°: Comuníquese a todos los Departamentos Docentes, a la Dirección de Estudiantes y Graduados, a la Dirección de Movimiento de Fondos, a la Dirección de Presupuesto y Contabilidad, a la Biblioteca de la FCEyN y a la Secretaría de Posgrado con copia del programa incluida. Cumplido, pase QBIOLOGICA#FCEN y resérvese.

ANEXO

Programa

1) FUNDAMENTOS DE LA MECANICA CUANTICA.

Nociones de espacios vectoriales. Espacio de estados. Operadores lineales. Operadores hermíticos y observables. Autoestados y autovalores. Conmutadores. Principio de incerteza. Operador paridad. Operadores unitarios. Notación de Dirac. Postulados de la Mecánica Cuántica. Reglas de cuantización. Relación entre probabilidad y amplitud. Interferencia cuántica. Propiedades de la ecuación de Schrödinger. Estados estacionarios y sistemas conservativos. Operador evolución y dinámica de funciones de onda. Matriz densidad y estadística cuántica.

2) APLICACIONES A SISTEMAS SENCILLOS.

Sistemas de dos niveles. Matrices de Pauli. Oscilador armónico. Operadores de creación y destrucción. Aplicaciones a fonones y fotones. Algebra del momento angular. Propiedades. Partícula en un potencial central. Sistemas hidrogenoides. Espin electrónico. Adición de momentos angulares. Coeficientes de Clebsch-Gordan. Teoría de perturbaciones independiente del tiempo. Método variacional. Aplicaciones a autoestados degenerados y no degenerados. Ejemplos simples: efectos Zeeman y Stark. Perturbaciones dependientes del tiempo. Interacción de una partícula con la radiación electromagnética. Fórmula de Rabi.

3) LA APROXIMACION DE HARTREE-FOCK.

La aproximación de Hartree-Fock. Operadores de Coulomb y de intercambio. El operador de Fock. Derivación de las ecuaciones de Hartree-Fock. Sistemas de partículas idénticas. Principio de Pauli y simetrización. Determinantes de Slater. Las ecuaciones canónicas de Hartree-Fock. Energías orbitales y el teorema de Koopmans. Utilización de funciones de base. Ecuaciones de Roothaan para el caso de moléculas de capa cerrada. El procedimiento de campo autoconsistente. Implementaciones computacionales. Ejemplos. Valores medios, análisis de orbitales moleculares y poblacionales. Funciones de base: funciones contraídas. Bases minimales. Funciones de polarización.

Métodos semiempíricos de orbitales moleculares. Reseña: métodos PPP, Hückel, CNDO, INDO. Hamiltonianos MNDO, MINDO, AM1 y PM3. Implementaciones computacionales. Ejemplos de cálculo en moléculas y sólidos. Sistemas de capa abierta.

Ecuaciones de Pople-Nesbet. Cálculos no restringidos de Hartree-Fock. Casos ilustrativos: energías totales, geometrías de equilibrio, modos normales de vibración, potenciales de ionización, estados excitados.

4) LA CORRELACION ELECTRONICA.

Funciones de onda multiconfiguracionales. Método de interacción de configuraciones (CI). Métodos de campo autoconsistente multiconfiguracionales (MCSCF) y de funciones de onda de valencia generalizadas. Métodos perturbativos. Teoría perturbacional de Moller-Plesset. Implementaciones computacionales. Aplicaciones a geometrías de equilibrio, potenciales de ionización y estados excitados. Teoría de los funcionales de la densidad. Implementaciones con funciones localizadas y con funciones de onda planas. Implementaciones computacionales. Aplicaciones a determinación de geometrías de equilibrio, modos normales de vibración y potenciales de ionización. Análisis de orbitales moleculares y poblacionales.

5) SIMETRIA MOLECULAR.

Elementos, operaciones y productos de operaciones de simetría. Grupos puntuales. Representaciones de grupos. Producto directo. Operador proyección. Aplicaciones.

6) TRANSICIONES MOLECULARES.

Rotaciones moleculares. Reglas de selección rotacionales. Estadística nuclear. Vibraciones moleculares. Espectro rotovibracional de moléculas diatómicas. Vibraciones de moléculas poliatómicas. Aplicaciones de la teoría de grupos. Anarmonicidades. Fuerzas de Coriolis.

Espectro electrónico de moléculas poliatómicas. Cromóforos. Transiciones vibrónicamente permitidas. Transiciones singulete-triplete. Decaimiento de la excitación. Conservación de la simetría orbital.

7) PROPIEDADES ELECTRICAS Y MAGNETICAS DE MOLECULAS.

Polarización eléctrica. Índice de refracción. Actividad óptica. Susceptibilidad magnética. Densidad de corriente diamagnética y paramagnética. Constantes de apantallamiento. Apantallamiento por grupos vecinos. Transferencia de carga.

Bibliografía:

- * Quantum Chemistry; I.Levine; Allyn and Bacon, 2a. Ed. 1974.
- * Modern Quantum Chemistry; A.Szabo y N.S.Ostlund; Mc.Graw Hill, 1989.
- * Molecular Quantum Mechanics; P.W.Atkins; 2a. Ed., Oxford University Press, 1988.
- * Approximate Molecular Orbital Theory; J.A.Pople y D.L.Beveridge; Mc.Graw Hill, 1970.
- * Ab-initio Molecular Orbital Theory; W.J.Hehre, L.Radom, P.Schleyer y J.Pople; Wiley, 1986.
- * Density Functional Theory of Atoms and Molecules; R.G.Parr y W.Yang; Oxford University Press, 1989.
- * Quantum Mechanics; A. Messiah; North Holland, 1961.
- * The principles of Quantum Mechanics; P.A. Dirac; 1962.
- * Quantum Mechanics; L.Schiff; McGraw Hill, 1968.
- * Quantum Mechanics; E. Merzbacher; Wiley, 1970.
- * Quantum Mechanics; C. Cohen-Tannoudji, B. Diu y F. Laloe; J.Wiley, 1977.
- * Quantum Mechanics. Non relativistic theory; L.D.Landau y El Lifschitz; Pergamon, 1965.