

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

DEPARTAMENTO: Física

ASIGNATURA: ESTRUCTURA DE LA MATERIA 3

CARRERA/S: Lic. en Ciencias Físicas

ORIENTACION:
PLAN:

CARACTER: Obligatorio

DURACION DE LA MATERIA: 1 (un) cuatrimestre

HORAS DE CLASE:	a) Teóricas..... ³	hs.	b) Problemas..... ²	hs.
	c) Laboratorio.....	hs.	d) Seminarios.....	hs.
			e) Totales..... ⁵	hs.

ASIGNATURAS CORRELATIVAS:

Trabajos Prácticos Física Teórica 2 y 3

I. Funciones de onda de muchos electrones

El problema electrónico en las moléculas. Unidades atómicas. Aproximación de Born-Oppenheimer. El principio de Exclusión de Pauli. Spin orbitales y orbitales espaciales. Productos de Hartree. Determinantes de Slater. La aproximación de Hartree-Fock. Elementos de la base de funciones. Ejemplo: la molécula de H₂ en el nivel de base mínima. Estados excitados. Energía de correlación e Interacción de Configuraciones.

II. Operadores y elementos de matriz en el problema molecular

Integrales mono y bi-electrónicas. Notación. Ejemplo: molécula de H₂ en base mínima. Reglas generales para elementos de matriz: su deducción. Transición de orbitales de spin a orbitales espaciales. Integrales de Coulomb y de Intercambio. Interpretación pseudo-clásica de la energía determinantal. Segunda cuantificación. Operadores de creación y de aniquilación. Relaciones de anticonmutación. Operadores en segunda cuantificación: elementos de matriz. Configuraciones spin-adaptadas: operadores de spin. Determinantes irrestrictos.

III. Elementos de estructura atómica

Elementos de estructura atómica. Momento angular en átomos de muchos electrones. El Hamiltoniano completo. Interacción spin-órbita. Niveles multipletes en átomos. Radiación de dipolo eléctrico y reglas de selección para átomos de muchos electrones. Estados excitados del átomo de He. Cálculos atómicos. Rotaciones y vibraciones de moléculas diatómicas. Energía rotacional de moléculas. Energía roto-vibracional de moléculas. Momento angular electrónico en moléculas. Transiciones electrónicas moleculares. Cálculos moleculares. Cálculos moleculares de Hartree-Fock.

IV. La aproximación de Hartree-Fock

Ecuaciones de Hartree-Fock. Operadores de Coulomb y de Intercambio. El principio variacional. Minimización de la energía asociada a un determinante de Slater. Interpretación de las soluciones de las ecuaciones de Hartree-Fock. Energías orbitales y Teorema de Koopman. Teorema de Brioullin. El hamiltoniano de Hartree-Fock.

IV. Sistemas de Hartree-Fock restringidos de capa cerrada. Ecuaciones de Roothaan-Hall

Estados de Hartree-Fock de capa cerrada. Spin orbitales restringidos. Base de funciones. Aproximación LCAO. Ecuaciones de Roothaan-Hall. La densidad de carga. Expresión para la matriz de Fock. Ortogonalización de la base. El procedimiento del campo autoconsistente. Valores de expectación y análisis poblacional.

V. Bases de funciones para moléculas poliatómicas

Bases de funciones gaussianas. Contracciones de bases gaussianas para el cálculo de propiedades moleculares. Base STO-3G. Bases de calidad doble zeta. Bases 4-31G^{*} y 6-31G^{*}. Ejemplos de cálculos con funciones de onda de capa cerrada. Energías totales. Potenciales de ionización. Geometrías de equilibrio. Análisis poblacional. Cargas y momentos dipolares.

VI. Formalismo irrestricto de Hartree-Fock de capa abierta. Ecuaciones de Pople-Nesbet

Spin orbitales irrestrictos. Hartree-Fock de capa abierta. Las ecuaciones de Pople-Nesbet. Densidad de spin. Expresión de la matriz de Fock. Solución de las ecuaciones SCF irrestrictas. Ejemplos ilustrativos.

VII. Métodos quasi-ab-initio y semiempíricos

Método quasi-ab-initio PRDO. Los métodos semiempíricos de Huckel y Huckel extendido. Los métodos semiempíricos autoconsistentes con la aproximación SDO. Los niveles de aproximación CNDO, INDO y NDDO. Sus parametrizaciones. Aplicaciones.

BIBLIOGRAFIA

- Modern Quantum Chemistry. Introduction to Advanced Electronic Structure Theory. A. Szabo y N.S. Ostlund, Mc Millan Publishing Co. (1982).
- Method of Molecular Quantum Mechanics. R. McWeeny and B.T. Sutcliffe. Academic Press, New York (1969)
- Applications of Electronic Structure Theory. Modern Theoretical Chemistry Vol. 4. H.F. Schaefer III (1977)
- Approximate Molecular Orbital Theory. J.A.Pople and D.L. Beveridge. Mc-Graw Hill, New York (1970).

Firma del Profesor:



Aclaración de Firma: Dra. Marta B. Ferraro

Firma del Director:

