

UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

DEPARTAMENTO: Física

ASIGNATURA: TEORIA CUANTICA DE SISTEMAS FINITOS

CARRERA/S: Doctorado

ORIENTACION:

PLAN:

CARACTER: Optativo

DURACION DE LA MATERIA: 1 (un) cuatrimestre

HORAS DE CLASE:	a) Teóricas.....4.....	hs.	b) Problemas.....3.....	hs.
	c) Laboratorio.....	hs.	d) Seminarios.....	hs.
			e) Totales.....7.....	hs.

ASIGNATURAS CORRELATIVAS

1. Aplicación del concepto de propagador en física molecular. Diferencia con los métodos convencionales. Consideraciones generales sobre la teoría cuántica de la estructura molecular electrónica. El Hamiltoniano. Aproximaciones orbitales y expansiones en términos de un conjunto completo. El método de segunda cuantización. Propiedades de anticonmutación de los operadores de creación y aniquilación. El espacio de Fock. Matrices densidad de primero y segundo orden. Expresión de operadores mecánico-cuántico en el lenguaje de segunda cuantización. Operadores de campo. Operadores tensoriales. Transformaciones unitarias de los orbitales
2. Teoría de perturbaciones. Derivación de las expresiones generales de la autofunción y energía. Teoría de perturbaciones de Moller-Plesset. Teoría de perturbaciones de muchos cuerpos. Expansión diagramática. Teorema del gráfico unido. Diagramas de Feynman. Diagramas de Brandow. Elementos de matriz y diagramas de tercer y cuarto orden.
3. El propagador causal de dos tiempos. Definiciones formales. Operador cronológico de Wick. Comportamiento temporal en términos de la integral de Fourier. Transformada de Fourier de la función de Green. Forma resolvente del propagador causal. Representación espectral y función densidad espectral. Propiedades del estado fundamental en términos del propagador: expresión de la matriz densidad de una partícula y energía de N partículas en términos de la función de Green. Amplitudes de Feynman-Dyson y spin orbitales naturales. Contorno de Coulson. Significado físico de polos y residuos.

PD

4. Aspectos de la aproximación de Hartree-Fock. Derivación del operador de Fock a partir de una expansión de momentos. El método variacional. Métodos algebraicos de solución: el método de la ecuación de movimiento. Condiciones estacionarias. Algebra de superoperadores. Superoperador resolvente. Producto binario de operadores. Carácter fermiónico y bosónico. Técnicas de proyección interna. Conjuntos completos de operadores. Análisis de polos y residuos. Expansión asintótica de momentos. Ecuación de Dyson. Métodos de aproximación. Truncación del manifold de operadores. Análisis del orden. Euestiones de hermiticidad. Particionamiento del espacio operador.
5. El propagador electrónico. Teorema de Koopmans. Análisis del orden de Rayleigh-Schrodinger. Elementos de matriz de operadores. Estructura del polo a través de segundo orden. Interpretación física. Análisis de tercer orden de la estructura del polo.
6. Desacoplamientos que conservan diagramas. El método de expansión diagramática. Teoría de perturbaciones. Equivalencia del formalismo de superoperadores y el método de expansión diagramática. Desacoplamientos renormalizados. Análisis diagramático. Diagramas y elementos de matriz de la autoenergía a segundo y tercer orden. Aproximantes de Pade.
7. El propagador de polarización. Análisis de polos y residuos. Condición de estabilidad. Conexión con el método de Hartree-Fock acoplado. Extensión multiconfiguracional del método de Hartree-Fock dependiente del tiempo. Elección de la función de referencia y manifold de operadores. Problema de hermiticidad. Representación espectral del propagador de polarización. Analisis del orden de Rayleigh-Schrodinger. Elección del espacio operador. Estructura de polos y residuos del propagador de polarización. Análisis de segundo orden de momentos de transición. Polarizabilidad dependiente de la frecuencia. Aplicaciones.

BIBLIOGRAFIA

- J. Linderberg y Y. Ohrn, "Propagators in Quantum Chemistry", Academic Press, New York, 1973.
- S. Raimes, "Many Electron Theory", North Holland Publishing Co, Amsterdam, 1972.
- L.S. Cederbaum y W. Domcke, Adv. Chem. Phys. 36, 205 (1977)
- G.Y. Csanak H.S. Taylor y R. Yaris, Adv. Atom, Molec, Phys, 7, 287 (1971)
- J. Oddershede, Adv. Quantum Chem. 11, 275 (1978).
- Y. Ohrn y G. Born. Adv. Quantum Chem. 13, 1 (1981)
- H. Primas, Separability in Many-Electron Systems, en "Modern Quantum Chemistry": Instambul Lectures, Vol. 2, Ed. :). Sinanoglu, pág 45, Academic Press, New York, 1965 .

fn

- R. McWeeny y B. T. Pickup, Rep. Prog. Phys., 43 , 1065 (1980).
- M.F. Hernan, K.F.Freed y D.L. Yeager, Adv. Chem. Phys. Ed. I. Prigogine y S.A. Rice, XLVIII, 1 (1981).
- P. Jorgensen y J. Simons, "Second Quantization-Based Methods in Quantum Chemistry". Academic Press, New York, 1981.
- R. Mills, "Propagators for Many-particle Systems", Gordon and Breach Science Publishers, New York, 1969.
- A. Szabo y N.S.Ostlund, "Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structural Theory" , Macmillan Publishing Co., New York, 1982.

Firma del Profesor:

Aclaración de Firma: Dr. Horacio Grinberg

Firma del Director


DR. GUILLERMO DÜSSEL
DIRECTOR
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

13 MAR 1992