

(11)



UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES

DEPARTAMENTO: de Física

ASIGNATURA: METODOS DE CALCULO DE PROPIEDADES MOLECULARES EN LA APROXIMACION
DE HARTREE-FOCK

CARRERA/S: Doctorado

ORIENTACION:

PLAN:

CHARACTER: Optativo

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

Primera parte: Configuración de Interacciones

1. Funciones de onda multiconfiguracionales. Estructura de la Matriz de CI completa. Normalización Intermedia y Expresión para la Energía de Correlación, Ejemplo: disociación de la molécula de H₂.
CI con excitaciones dobles (DCI)
Inclusión de orbitales naturales y convergencia del cálculo CI.
2. Método de Campo Autoconsistente Multiconfiguracional.
Métodos de Unión de Valencia Generalizados (GVB).
Truncamiento del Desarrollo CI y problema de consistencia.

Segunda Parte: Teoría de Perturbaciones independientes del tiempo

3. Teoría de Rayleigh-Schrödinger (RS)
Representación diagramática de la Teoría de Perturbaciones para dos estados.
Representación diagramática de la perturbación para N estados.
Teoría de perturbaciones orbitales: perturbaciones de una partícula.
4. Teoría de Orbitales Moleculares y Propagadores. Formalismo de Segunda Cuantificación. Estadística de Fermi y Principio de Exclusión de Pauli en Segunda Cuantificación. Operadores mono y bielectrónicos en Segunda Cuantificación. Cálculos variacionales autoconsistentes. Función de Green. Algebra de Superoperadores. Conjuntos completos de Operadores. El propagador de Polarización. Aproximación RPA al propagador de Polarización.
5. Corrección de Segundo Orden a la Energía en el formalismo de Hartree-Fock Acoplado (CHF). Expresión de la Energía a Segundo orden como suma sobre los estados.

g



Tercera Parte: Aplicaciones

6. Hamiltoniano electrónico de una molécula en un campo electromagnético. Desarrollo perturbativo del hamiltoniano. Expresión de los hamiltonianos parciales. Desarrollo perturbativo de la energía y de la función de onda.
7. Propiedades Moleculares de origen magnético: Constante de acoplamiento de spin; tensor de apantallamiento magnético; tensor de susceptibilidad magnética. Invariancia de medida y su relación con las reglas de Thomas-Reiche-Kuhn. Propiedades moleculares de origen eléctrico: Momento dipolar; Polarizabilidad.

BIBLIOGRAFIA

- Modern Quantum Chemistry: Introduction to Advanced Electronic Structure Theory. A. Szabo, N.S. Ostlund (1980).
- The Method of Configuration Interactions, I. Shavitt, in Methods of Electronics Theory, H.F. Schaeffer III, N. Y. (1977).
- Second Quantization Based Methods in Quantum Chemistry. P. Jörgensen, J. Simons. Academic Press., N.Y. (1981).
- R.M. Stevens, R.M. Pitzer y W.N. Lipscomb, J. Chem. Phys., 38 (1963) 550.
- R. Ditchfield, D.P. Miller y J. A. Pople, J. Chem. Phys., 54 (1971) 4186.
- H. Nakatsuji, J. Chem. Phys., 61 (1974) 3728.

Firma del Profesor:

Aclaración de Firma: Dra. Marta B. Ferraro

Firma del Director:

13 SET 1992

J. Dusel
Dr. GUILLERMO DUSSEL
DIRECTOR
DEPARTAMENTO DE FISICA