



# METODOS DE QUIMICA CUANTICA

Materia de posgrado

Prof. : Martín C. Ruiz de Azúa

Carga horaria: teóricas: 4 hs. semanales

prácticas: 4 hs. Semanales

Las prácticas consistirán de la preparación y exposición de temas especiales y/o lectura de trabajos sobre los temas del curso.

## CONTENIDOS

1. Análisis de la condición de extremo del estado de Hartree-Fock. Inestabilidades. El método de HF acoplado para el cálculo de propiedades. Solución iterativa y analítica de las ecuaciones.
2. Segunda cuantificación. Representación de estados y operadores. Hamiltoniano molecular. Orden normal de operadores. Teorema de Wick. Función de Green de una partícula. Polos y residuos. Evaluación de propiedades a partir de la función de Green de una partícula. Encendido adiabático. Teorema de Gellmann-Low. Desarrollo diagramático (MBPT). Propagador de polarización. Ecuación de movimiento. Polos y residuos. Análisis diagramático. Aproximaciones TDA y RPA.
3. Breve reseña del método de superoperadores de Oddershede en la evaluación de propagadores. Comparación con otros métodos. Aproximaciones FOPPA y SOPPA.
4. Método de la funcional de la densidad. Teorema de Hohenberg y Kohn. Método de Kohn y Sham. Ejemplos de funcionales de la densidad: de Thomas, de Fermi, LDA (aproximación local de la densidad). Resultados para átomos y moléculas.
5. Química cuántica relativista. La ecuación de Klein-Gordon. La ecuación de Dirac. Límite no relativista. Atomo de hidrógeno. Sistemas de muchos electrones. La ecuación de Breit. Hamiltoniano molecular. Hamiltonianos efectivos. Efectos del tamaño nuclear. Correcciones relativistas al Hamiltoniano molecular. Su efecto sobre propiedades moleculares.

M. C. Ruiz de Azúa

Bibliografía

1. A. Szabó y N. S. Ostlund, "Modern Quantum Chemistry", McGraw-Hill, N. Y., 1982.
2. R. McWeeney, "Methods of Molecular Quantum Mechanics", 2d. edición, Academic Press, 1992.
3. Serie "Reviews in Computational Chemistry", K. B. Lipscomb y D. B. Boyd Eds., VCH.
4. A. L. Fetter y J. D. Walecka, "Quantum Theory of Many-Particle Systems", McGraw-Hill, N. Y., 1969.
5. R. M. Dreizler y E. K. U. Gross, "Density Functional Theory", Springer-Verlag, Berlin, 1990.
6. R. E. Moss, Advanced Molecular Quantum Mechanics, Chapman y Hall, London, 1972.

McWeeney

McWeeney