

**Física Atómica y Molecular** (Materia Optativa, Cod. 2305)

**Temas de Física** (Materia de Postgrado:, Cod. D1123)

**2do Cuatrimestre de 2009**

Profesor: J. E. Miraglia

Colaboradores: D. Arbó, M.S. Gravielle, D. Mitnik y C. Montanari.

---

**Horarios y días:** *Lunes y jueves de 17:00 a 22:00hs*

---

**OBSERVACIONES**

**PROGRAMA DE LA MATERIA**

**ORGANIGRAMA DE CLASES**

**NOTAS DE CLASES**

**LISTA DE PROBLEMAS**

**PRACTICAS COMPUTACIONALES**

---

FISICA ATOMICA. (Optativa 2305)  
TEMAS DE FISICA. (Postgrado D1123)  
2DO CUATRIMESTRE 2009

Profesor: J. E. Miraglia

Colaboradores: D. Arbó, M.S. Gravielle, D. Mitnik y C. Montanari.

---

## **PROGRAMA**

### MODULO 1. ESTADOS LIGADOS

#### REPASO ATOMO DE HIDROGENO.

Unidades atómicas. Estados ligados. Espacio de coordenadas. Orbitales de Slater. Condición de Kato. Regla de Openheimer. Ecuación de Schrodinger en el espacio de los momentos. Pseudopotenciales. Expresiones. Pseudo potenciales y modelo de electron independiente.

#### REPASO. ATOMOS CON MUCHOS ELECTRONES: HARTREE FOCK Y OTROS.

Átomos y iones con dos electrones. El Helio. Método de LeSech-Frolov. Método de Close-Coupling. Hartree Fock elemental: caso del Helio. Sistemas con muchos electrones: Hartree Fock. Determinante de Slater. Reglas para tratar operadores de 1 y 2 partículas. Principio variacional. Ecuación de Hartree Fock: Energías y funciones de onda. Bases de Slater, gaussianas y numéricas.

#### THOMAS FERMI Y APLICACIONES.

Gas de electrones libres. Velocidad de Fermi. Modelo de Thomas Fermi. Ecuación del potencial y de la densidad. Soluciones. Exacta y aproximadas. Comportamiento a pequeñas y grandes distancias. Energía cinética, potencial y de repulsión electrónica. El funcional de Lenz-Jensen. Conexión con Hartree Fock. Potencial de intercambio. Generalización del funcional de Lenz-Jensen. Energía de intercambio. Apantallamiento de una partícula en un gas de electrones libres. Longitud de Debye. Respuesta dieléctrica de Thomas Fermi

---

### MODULO 2. ESTADOS DEL CONTINUO, FORMALISMO Y COLISIONES

#### ESTADO CONTINUO DEL POTENCIAL CULOMBIANO.

Condiciones asintóticas del estado continuo. La amplitud de scattering. Culombiana. Polos. Reversibilidad temporal. Funciones entrantes y salientes. Expresión general. La función hypergeométrica degenerada. Sección eficaz diferencial de Rutherford. Espacio de los momentos. Integrales de Nordsieck

#### TEORIA FORMAL DE SCATTERING. POTENCIAL CENTRAL

Ecuación de Lippmann Schwinger y los operadores de Green. El operador de Moeller, la matriz de transición y la matriz S. Propiedades del operador de Moeller. Propiedades de los operadores S y T. Unitariedad y teorema optico. Serie perturbativa de la funcion de onda. Serie perturbativa de la matriz de transición. Potenciales de Yukawa, Culombiano y pozo esferico. Sobre el potencial Culombiano off-energy-shell (fuera de la capa de energía). Discontinuidades off-shell.

#### SCATTERING.

Solución exacta en término de los desfasajes. Matriz S, unitariedad y polos. Matriz T, unitariedad. Scattering length. Resonancias. El teorema óptico.

Scattering de Mott para fermiones y bosones.

#### FORMALISMO DEPENDIENTE DEL TIEMPO.

Ecuación de Schroedinger dependiente del tiempo. Cuadro de interacción. Operador desarrollo temporal. Propiedades. Operador de Moeller. Probabilidad de transición. Sección eficaz. Misceláneas.

#### FORMALISMO DEL PAQUETE DE ONDA.

Considerandos. Scattering sin paquetes. Repaso. Formación de un paquete libre. Dimensiones del paquete. Propagacion y ensanchamiento del paquete libre. Introducción del parámetro de impacto. El flujo del paquete libre. Dinámica del movimiento del paquete. Sección eficaz. Generalizaciones. Dos paquetes y el centro de masa. Iones negativos. Casos particulares.

#### TEORIA FORMAL GENERAL DE SCATTERING.

Sistema colisionante. Canal inicial. Canal directo o excitación. Canal de captura (o reordenamiento o intercambio) electrónico

Canal de fragmentación total (o ionización). Ecuación de Lippmann Schwinger generalizada. Operadores de Green. Matriz de Transición y su serie perturbativa Propiedad de Unitariedad del operador de Moeller. La matriz S y la Fermi Golden Rule.

**PROCESOS INELASTICOS. EXCITACIÓN. CAPTURA E IONIZACION**

**Excitación.** Primera aproximación de Born. Límite asintótico. Transiciones prohibidas y permitidas

**Captura.** Primera aproximación de Brinkman Kramers. Estimaciones de la segunda aproximación. Límites asintóticos a grandes velocidades.

**Ionización.** Primera aproximación de Bethe. Modelo Binario. Stopping power

**MODULO 3. INTERACCION MATERIA RADIACION**

**REPASO. CAMPOS CLASICOS.**

Lagrangiano y hamiltoniano de una partícula en un campo EM. Primera cuantificación. Estados de Volkov. Invariancia de gauge. Ecuaciones de Maxwell y el potencial vector A. Radiación electromagnética clásica. Derivación de Campos eléctricos y magnéticos. Densidad de energía. Vector de Poynting. Fuentes reales y el sol. Aproximación dipolar. Hamiltoniano semiclásico. Cuantificación en la caja

**SEGUNDA CUANTIFICACION.**

Repaso, operadores de creación y destrucción. Algebra. Propiedades. El Hamiltoniano materia radiación, expresión estacionaria. Elementos de matriz. La regla de oro de Fermi. Aproximación dipolar Formas alternativas de la longitud y la aceleración

**CREACION DE UN FOTON.**

Introducción. **Emisión radiativa.** Formalismo. Estimaciones. Oscillator strengths y la regla de suma de Thomas-Reiche-Kuhn. Componentes cartesianas y esféricas del vector de polarización. Reglas de selección. Vida media y cascadas. Cascadas en el átomo de hidrogeno. Vidas medias y anchos de línea. **Anchos experimentales.** Collisional broadening. Doppler Broadening. **Captura radiativa.** El proceso en cuestión. Emisión espontánea de un fotón. Captura o recombinación radiativa. Implicancias físicas. **Bremsstrahlung.** El proceso en cuestión Emisión de un fotón. Estimación y predicciones. Formula de Bethe. Espectro energéticos. **Creación de pares** en presencia de núcleos. Notas sobre el cálculo. Creación de pares en presencia de electrones atómicos. Procesos nucleares. Una idea de valores.

**DESTRUCCION DE UN FOTON.**

**Efecto fotoeléctrico.** El proceso en cuestión. Absorción de un fotón. Estimación y predicciones. Misceláneas. **Balance detallado.** Cuerpo negro. Distribución de Boltzman, ley de Plank. Coeficientes de Einstein

**TRANSICION DE DOS FOTONES.** Formalismo. El proceso en cuestión. Absorción de un fotón, Estimación y predicciones. Misceláneas. **Scattering de Thompson.** El proceso en cuestión. El radio de Thompson. Interpretación clásica del radio de Thompson. El scattering de luz. Luz polarizada. Luz no polarizada. **Scattering de Compton.** El proceso en cuestión. Conservación de energía y momento semirelativista. El elemento de matriz. Formula de Klein-Nishina. Proceso múltiple. **Raman scattering.** El proceso en cuestión. Expresión de Raman. Líneas de Stokes y antiStokes. **Rayleigh scattering.** El proceso en cuestión. Ecuación de Kramer y Heisenberg. Fundamentación de la Óptica. dispersion de Rayleigh. Sección eficaz. Límite de baja energía. Porque el cielo se ve azul? y otras preguntas. El Modelo clásico.

**MODULO 4. ELECTRONES EN SÓLIDOS (FALTA ORGANIZAR EN DETALLE)**

Tratamiento cuántico. Energía cinética. Hartree Fock. Energía de intercambio. Respuesta dieléctrica. Polarización. Respuesta dieléctrica de Lindhard. Potencial estático Oscilaciones de Fridel. Potencial dinámico (wake riding). Transiciones inelásticas, electrón-agujero y plasmones. Stopping power. Straggling. Límites de bethe y Fermi-Teller

FISICA ATOMICA Y MOLECULAR. (Optativa Nro.2305 )

TEMAS DE FISICA. (Postgrado Nro. D1123)

DIAGRAMA DE CLASES

2DO CUATRIMESTRE 2009

Profesor: J. E. Miraglia

Colaboradores: D. Arbó, M.S. Gravielle, D. Mitnik y C. Montanari.

## **BIBLIOGRAFIA**

McDowell and Coleman. *Introduction to the theory of ion-atom collisions* (North Holland 1970)

Goldberger and Watson. *Collision theory* (John Wiley & son, N.Y. 1964)

Joachain C.J. *Quantum collision theory* (North Holland 1979)

Lindgren I. and Morrison, J. *Atomic many-body theory* (Springer Verlag 1986)

Heitler W. *The quantum theory of radiation.* (Oxford university 1954)

Rau, A.R.P. *Astronomy-inspired atomic and molecular Physics* (Kluwer academic publishers 2002)

Bethe H.A. and Salpeter, EE. *Quantum mechanics of one- and two- electron atoms*  
(Springer Verlag 1957)

Bransden B.H. and Joachain C.J. *Physics of atoms and molecules* (John Wiley & son 1991)

Sakurai, J. J. *Modern Quantum mechanics* (Adison 1994)

Cohen Tannoudji, y colaboradores. *Photons and Atoms Introduction to quantum Electrodynamics*  
(2000)



**FISICA ATOMICA Y MOLECULAR. (Optativa Nro.2305 )****TEMAS DE FISICA. (Postgrado Nro. D1123)****DIAGRAMA DE CLASES****2DO CUATRIMESTRE 2009****Profesor: J. E. Miraglia****Colaboradores: D. Arbó, M.S. Gravielle, D. Mitnik y C. Montanari.****MODULO 1. ESTADOS LIGADOS**

- 01. Repaso. Átomos hidrogénicos (Dario M.)
- 02. Átomos con muchos electrones (Dario M.)
- 03. Hartree Fock (Dario M.)
- 04. Thomas Fermi (Claudia M.)
- 05. Funcional de Lenz-Jensen (Claudia M.)

**MODULO 2. ESTADOS DEL CONTINUO, FORMALISMO Y COLISIONES**

- 06. Estado del continuo del potencial Colombiano (M. Silvia)
- 07. Scattering por un potencial central (M. Silvia)
- 08. Teoría formal de Scattering del potencial central (M. Silvia)
- 09. Teoría Formal de Scattering (M. Silvia)
- 10. Procesos directos. Excitación e ionización (M. Silvia)
- 11. Intercambio de carga (M. Silvia)
- 12. Formalismo dependiente del tiempo (Dario M.)
- 13. Formalismo del paquete de onda (Dario M.)

**MODULO 3. INTERACCION MATERIA RADIACION**

- 14. Repaso. Campos clásicos (Diego A.)
- 15. Operadores y segunda cuantificación (Diego A.)
- 16. Intercambio de carga e ionización (Diego A.)
- 17. Emisión fotónica (Diego A.)
- 18. Bremsstrahlung (Diego A.)
- 19. Transición de dos fotones (Diego A.)
- 20. Compton y Thompson (Diego A.)
- 21. Raman y Rayleigh (Diego A.)

**MODULO 4. ELECTRONES EN SÓLIDOS**

- 22. Tratamiento cuántico (Claudia M.)
- 23. Respuesta dieléctrica de Lindhard (Claudia M.)
- 24. Potenciales. Plasmones (Claudia M.)
- 25. Stopping (Claudia M.)

**FISICA ATOMICA Y MOLECULAR. (Optativa Cod. 2305 )**  
**TEMAS DE FISICA. (Postgrado Cod. D1123)**

**2DO CUATRIMESTRE 2009**

**Profesor: J. E. Miraglia**

**Colaboradores: D. Arbó, M.S. Gravielle, D. Mitnik y C. Montanari.**

---

## **NOTAS DE CLASES. PIZARRON**

NOTAS 1

NOTAS 17

NOTAS 2

NOTAS 18

NOTAS 3

NOTAS 19

NOTAS 4

NOTAS 20

NOTAS 5

NOTAS 21

NOTAS 6

NOTAS 22

NOTAS 7

NOTAS 23

NOTAS 8

NOTAS 24

NOTAS 9

NOTAS 25

NOTAS 10

NOTAS 26

NOTAS 11

NOTAS 27

NOTAS 12

NOTAS 28

NOTAS 13

NOTAS 29

NOTAS 14

NOTAS 30

NOTAS 15

NOTAS 31

NOTAS 16

NOTAS 32

APENDICE

**FISICA ATOMICA Y MOLECULAR. (Optativa Cod. 2305 )**  
**TEMAS DE FISICA. (Postgrado Cod. D1123)**

**2DO CUATRIMESTRE 2009**

**Profesor: J. E. Miraglia**

**Colaboradores: D. Arbó, M.S. Gravielle, D. Mitnik y C. Montanari.**

---

## **PRACTICAS**

**HIDROGENO (Dario Mitnik)**

**Hidrogeno 1**

**Hidrogeno 2**

**Hidrogeno 3**

**THOMAS FERMI (Claudia Montanari)**

**Guia TF**

**Modelo TF**

**Matemática TF**

**COLISIONES (Ma. Silvia Gravielle)**

**Guias**

**MATERIA RADIACION (Diego Arbo)**

**Guia**

**IONES EN SOLIDOS (Claudia Montanari)**

**Guia**

**FISICA ATOMICA Y MOLECULAR. (Optativa Cod. 2305 )**  
**TEMAS DE FISICA. (Postgrado Cod. D1123)**

**2DO CUATRIMESTRE 2009**

**Profesor: J. E. Miraglia**

**Colaboradores: D. Arbó, M.S. Gravielle, D. Mitnik y C. Montanari.**

---

**PRACTICAS COMPUTACIONALES**

1. **Introducción a Unix**
  2. **Introducción a Mathematica** [HTML](#) [PostScript](#) [pdf](#)
  3. **Introducción a Fortran (1)**
  4. **Introducción a Fortran (2)**
  5. **La ecuación de Schrödinger: Pozo infinito** [HTML](#) [PostScript](#) [pdf](#)
  6. **La ecuación de Schrödinger: Estados Ligados** [HTML](#) [PostScript](#) [pdf](#)
  7. **La ecuación de Schrödinger: Pozo finito** [HTML](#) [PostScript](#) [pdf](#)
  8. **La ecuación de Schrödinger: oscilador armónico** [HTML](#) [PostScript](#) [pdf](#)
  9. **Solución de la ecuación de Schrödinger por diagonalización**
  10. **La ecuación de Schrödinger: estados continuos** [HTML](#) [PostScript](#) [pdf](#)
  11. **Paquetes de Onda**
  12. **Dinámica Cuántica**
  13. **Operadores de Creación y aniquilación** [HTML](#) [PostScript](#) [pdf](#)
  14. **Estados Coherentes** [HTML](#) [PostScript](#) [pdf](#)
  15. **Propagación temporal**
-