



FIS. 2013



FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES
U.B.A

- 1- DEPARTAMENTO : **FÍSICA**
- 2.- CARRERA a) Licenciatura en: **ORIENTACIÓN**
b) Doctorado y/o Post-Grado en **CS. FÍSICAS**
c) Profesorado en:
d) Cursos Técnicas en Meteorología:
e) Cursos de Idiomas:
- 3.- 1er. CUATRIMESTRE/**2do. CUATRIMESTRE** Año: **2013**
- 4.- N° DE CÓDIGO DE CARRERA:
- 5.- MATERIA : *Física de muchos cuerpos: El formalismo de la segunda cuantización en sistemas atómicos y moleculares.*
- 6.- PUNTAJE PROPUESTO: **5 (cinco) puntos.**
- 7.- PLAN DE ESTUDIO: 1987
- 8.- CARACTER DE LA MATERIA.: **Postgrado**
- 9.- DURACION: **16 (dieciseis) semanas.**
- 10.- HORAS DE CLASES DIARIAS:
 - a) Teóricas: **4 (cuatro) hs.** d) Seminarios: **hs.**
 - b) Problemas: **4 (cuatro) hs.** e) Teórico-problemas: **hs.**
 - c) Laboratorio: **hs** f) Teórico-prácticas: **hs.**
 - g) Totales Horas: **8 (ocho) hs.**
- 11.- CARGA HORARIA TOTAL: **128 (ciento veintiocho) hs.**
- 12.- ASIGNATURAS CORRELATIVAS: -----
- 13.- FORMA DE EVALUACION: **Dos parciales y examen final.**
- 14.- PROGRAMA ANALITICO: **Se adjunta.**
- 15.- BIBLIOGRAFIA: **Se adjunta.**
- 16.- ARANCEL:

FECHA: 3 de abril de 2013

FIRMA PROFESOR:

ACLARACION FIRMA: Dr. Roberto Bochicchio

FIRMA DIRECTOR

PROGRAMA

Capítulo 1: Estados del sistema. Estados puros y spin-adaptados. Adaptación. Espacio de Fock. Descripción mediante Matrices Densidad. Sistemas cerrados y abiertos. Modelos de partícula independiente y correlación electrónica.

Capítulo 2: Introducción a la representación del número de ocupación. Oscilador armónico. Cadenas.

Capítulo 3: Operadores de creación y aniquilación. Algebra de operadores: relaciones de conmutación y anti-conmutación. Representación de operadores en 2da. cuantización. Operadores de 1- y 2-partículas. Operadores Hamiltonianos. Operadores y conservación del número de partículas. Operadores de ocupación. Operador número de partículas. Operadores de excitación.

Capítulo 4: Producto de operadores en 2da. cuantización. Operadores producto. Relaciones canónicas de conmutación y para-conmutación. Comparación de los operadores en la 1ra. y 2da. cuantización.

Capítulo 5: El Spin en la 2da. cuantización. Funciones de spin. Operadores en la base orbital. Operadores libres de spin. Operadores de spin. Operadores mixtos. Operadores tensoriales de spin. Operadores de creación y aniquilación. Operadores de creación de 2-partículas. Operadores de excitación. Operadores de excitación singletes.

Capítulo 6: Determinantes: sus propiedades de spin. Consideraciones generales. Proyecciones de spin. Spin total. Configuraciones de funciones de estado (CSF). Acoplamiento de CSFs. Ejemplos. Completitud y ortonormalidad. Transformaciones. Acoplamiento de operadores.

Capítulo 7: Matrices densidad reducidas de 1- y 2-partículas (RDM). Repre-

sentación matricial y de coordenadas. Propiedades. Problema de la representabilidad. Operadores de campo: conexión entre la representación de coordenadas (continua) y la discreta. Descomposición topológica del espacio físico. Interpretación y significado físico.

Capítulo 8: Matrices densidad de partículas, de spin, densidades. Descomposición de Lewis de la 1-partícula: apareamiento y desapareamiento. Estructura de la p-RDMs.

Capítulo 9: Tratamiento de sistemas con número de partículas no entero: ensemble Grand-canónico. Derivadas respecto al número de partículas. Reactividad, potencial químico, electronegatividad.

Bibliografía:

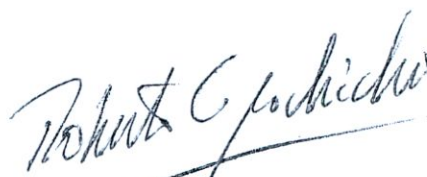
"Modern Quantum Chemistry. Introduction to Advanced Electronic Structure Theory", A. Szabo y N. S. Ostlund, McMillan Publ. Co. (1982).

"Methods of Molecular Quantum Mechanics", R. McWeeny, Academic Press (1992)

"Molecular Electronic-Structure Theory", T. Helgaker, P. Jorgensen, J. Olsen, Wiley (2000)

"Second Quantized Approach to Quantum Chemistry. An elementary approach", P. Surján, Springer (1989)

"Density-Functional Theory of Atoms and Molecules", R. G. Parr and W. Yang, Oxford University Press, New York, 1989.



Profesor: Dr. Roberto C. Bochicchio

Marzo de 2013



Universidad de Buenos Aires
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Ref. Expte. N° 502.218 /2013

Buenos Aires, 06 MAY 2013

VISTO:

la nota 03/04/2013 presentada por el Dr. Pablo Mininni, Director del Departamento de Física en la que se eleva información y programa del curso de posgrado: **Física de muchos cuerpos: el formalismo de la segunda cuantización en sistemas atómicos y moleculares**, que dicta el Dr. Robertó Bochicchio en el 2º cuatrimestre de 2013

CONSIDERANDO:

lo actuado en la Comisión de Doctorado de la FCEN el 16/04/2013
lo actuado en la Comisión de Enseñanza, Programas, Planes de Estudio y Posgrado,
lo actuado por este cuerpo en Sesión Ordinaria realizada en el día de la fecha,
en uso de las atribuciones que le confiere el Artículo N° 113 del Estatuto Universitario,

EL CONSEJO DIRECTIVO DE LA FACULTAD DE
CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES
RESUELVE

Artículo 1º: Autorizar el dictado del curso de posgrado **Física de muchos cuerpos: el formalismo de la segunda cuantización en sistemas atómicos y moleculares** de 128 hs de duración.

Artículo 2º: Aprobar el programa del curso de posgrado **Física de muchos cuerpos: el formalismo de la segunda cuantización en sistemas atómicos y moleculares** obrante a fs 1 (de ambas caras) del expediente de la referencia.

Artículo 3º: Aprobar un puntaje máximo de cinco (5) puntos para la Carrera del Doctorado.


Artículo 4º: Aprobar un arancel de 20 módulos. Disponer que los montos recaudados serán utilizados conforme a lo dispuesto por Resolución CD N° 072/03.


Artículo 5º: Comuníquese a la Dirección del Departamento de Física, a la Biblioteca de la FCEN y a la Subsecretaría de Postgrado (con fotocopia del programa incluida fs 1 ambas caras).

Artículo 6º: Comuníquese a la Dirección de Alumnos (sin fotocopia del Programa). Cumplido, archívese.

RESOLUCION CD N°
SPmed 22/04/2013

798


Dr. JAVIER LÓPEZ DE CASENAVE
SECRETARIO ACADÉMICO


Dr. PABLO MININNI
DIRECTOR DEL DEPARTAMENTO DE FÍSICA