



PROGRAMA SEGUNDO CUATRIMESTRE DE 2017
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES
U.B.A.

- 1.- DEPARTAMENTO de Física
- 2.- CARRERA de: a) Licenciatura en Cs. Físicas ORIENTACION:
 - b) Doctorado y/o Post-Grado
 - c) Profesorado en
 - d) Cursos técnicos
 - e) Cursos de Idiomas
- 3.- 2º cuatrimestre Año: 2017
- 4.- NUMERO DE CODIGO DE CARRERA: 02
- 5.- MATERIA: ESTRUCTURA DE LA MATERIA 3
- 6.- PUNTAJE PROPUESTO (en caso de tratarse de materias optativas para la Licenciatura o de Doctorado y/o Post-grado).....
- 7.- PLAN DE ESTUDIO: 1987
- 8.- CARÁCTER DE LA MATERIA: Obligatorio
- 9.- DURACION: Cuatrimestral
- 10.- HORAS DE CLASE SEMANAL:
 - a) Teóricas: 3 hs
 - b) Problemas: 3 hs
 - c) Laboratorio: no corresponde
 - d) Seminarios: no corresponde
 - e) Teórico-problemas: no corresponde
 - f) Teórico-prácticas: no corresponde
 - g) Totales horas: 6 hs
- 11.- CARGA HORARIA TOTAL CUATRIMESTRE: 96 hs
- 12.- ASIGNATURAS CORRELATIVAS PARA LA CURSADA (Indicar si se requiere final o TP aprobado): TP Física Teórica 2; TP Física Teórica 3
- 12b.- ASIGNATURAS CORRELATIVAS PARA RENDIR FINAL:
Final Física Teórica 2; Final Física Teórica 3
- 13.- FORMA DE EVALUACIÓN: Examen final.
- 14.- PROGRAMA ANALITICO: (se adjunta)
- 15.- BIBLIOGRAFIA: (se adjunta)


Dra. Paula Villar
Secretaria Académica
Departamento de Física

FIRMA PROFESOR:
ACLARACION FIRMA:
FECHA:



FIRMA DIRECTOR:
SELLO:
DRA. ANDREA BRAGAS
DIRECTORA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
FCEyN -UBA



ESTRUCTURA DE LA MATERIA 3

Programa Analítico 2º Cuatrimestre Año 2017

Contenidos:

Capítulo 1: Introducción al Problema Atómico: Generalidades sobre la estructura de los átomos: Principio *Aufbau*. Configuraciones, niveles de energía. Apantallamiento y correlación electrónicos. Estados individuales de los electrones (aproximación de un electrón). Estados del átomo. Modelo de capas: llenado. Periodicidad: concepto y apartamientos: la Tabla periódica de los elementos.

Capítulo 2: Funciones de Estado de Muchos Electrones: El Hamiltoniano del problema molecular. Unidades atómicas. Desacoplamiento de la ecuación de Schrödinger. La aproximación de Born-Oppenheimer (B.O.): interpretación y limitaciones. Aproximación de núcleo fijo: más allá de B.O.. Efecto Jahn-Teller. El movimiento nuclear. El principio de exclusión de Pauli. Spin orbitales y orbitales espaciales. Productos de Hartree. Determinantes de Slater. La aproximación de Hartree-Fock. Elementos de la base de funciones. Ejemplo: la molécula de H_2 en el nivel de base mínima. Estados excitados. Energía de correlación e interacción de configuraciones.

Capítulo 3: Operadores y elementos de matriz en el problema molecular: Integrales mono- y bielectrónicas. Notación. Ejemplo: la molécula de H_2 en el nivel de base mínima. Reglas generales para los elementos de matriz: deducción. Transición de spin-orbitales a orbitales espaciales. Integrales de Coulomb y de intercambio. Interpretación semicásica de la energía determinantal. Configuraciones spin-adaptadas: operadores de spin. Determinantes irrestrictos.

Capítulo 4: La Aproximación de Hartree-Fock: Ecuaciones de Hartree-Fock. Operadores de Coulomb y de intercambio. El principio variacional lineal. Minimización de la energía asociada a un determinante de Slater. Interpretación de las soluciones de las ecuaciones de Hartree-Fock. Energías orbitales y teorema de Koopmans. Teorema de Brillouin. El Hamiltoniano de Hartree-Fock.

Capítulo 5: Sistemas de Hartree-Fock restrictos de capa cerrada. Ecuaciones de Roothaan: Estados de Hartree-Fock restrictos de capa cerrada. Spin orbitales restringidos. Base de funciones. Aproximación LCAO. Ecuaciones de Roothaan-Hall. Expresión de la matriz de Fock. Ortogonalización de la base. Procedimientos de campo autoconsistente (SCF). Bases de funciones para moléculas poliatómicas: expansiones gaussianas. Contracciones de bases gaussianas para el cálculo de propiedades moleculares. Jerarquía de las bases: STO-NG, bases de calidad DZ bases con funciones de polarización.

Capítulo 6: Introducción a los modelos computacionales: Sistema Gaussian. Cálculo de funciones de estado y propiedades. Análisis de los resultados.

Capítulo 7: Funciones de Estado Post Hartree-Fock: Interacción de Configuraciones (CI}): Funciones de estado multi-configuracionales y estructura de la "full CI". Excitaciones dobles. Ejemplos. Matriz densidad de 1-partícula y orbitales naturales. Método multi-configuracional autoconsistente y "valence bond" generalizado. CI truncada y consistencia de tamaño. Discusión del equilibrio entre la dimensión de la base y la correlación necesaria.

Capítulo 8: Matrices Densidad Reducidas. Segunda cuantificación: operadores de creación y aniquilación. Relaciones de anticomutación. Operadores en el lenguaje de segunda cuantificación: elementos de matriz. Operadores de densidad reducidas y matrices densidad de carga, pares electrónicos, corrientes, etc.. Valores medios y descripción de la distribución de partículas: análisis de población. Teoría cuántica de la valencia: ligaduras y formas complejas de unión. Conceptos de huecos. Efectos de la correlación electrónica.

Dra. Paula Villar
Secretaría Académica
Departamento de Física

DRA. ANDREA BRAGAS
DIRECTORA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
FCEyN-UBA



Capítulo 9: Funciones de Estado Nuclear y Electrónica. El problema nuclear: La estructura molecular. Cuestiones de espectroscopía molecular: transiciones rotacionales, vibracionales y electrónicas. El principio de Franck-Condon.

Bibliografía

1. "Modern Quantum Chemistry. Introduction to Advanced Electronic Structure Theory", A. Szabo y N. S. Ostlund, McMillan Publ. Co. (1982).
2. "Methods of Molecular Quantum Mechanics", R. McWeeny, Academic Press (1992)
3. "Applications of Electronic Structure Theory. Modern Theoretical Chemistry", H. F. Schaeffer III (1977).
4. "Approximate Molecular Orbital Theory", J. A. Pople y D. L. Beveridge, McGraw Hill (1970).
5. "Applied Quantum Chemistry", G. Naray-Szabó, P. Surján y J. Angyán, Akadémiai Kiado, Budapest (1987).
6. "The Physics of Atoms and Quanta", H. Haken y H. Wolf, Springer, (1996).
7. "Molecular Physics and Elements of Quantum Chemistry", H. Haken y H. Wolf, Springer, (1996).


Dra. Paula Villar
Secretaría Académica
Departamento de Física


DRA. ANDREA BRAGAS
DIRECTORA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
FCEyN -UBA