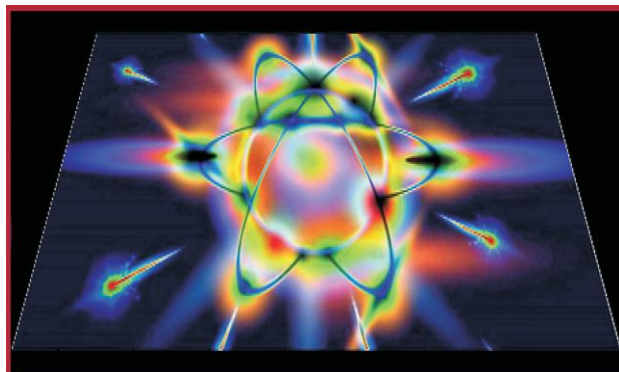




Curso de Posgrado

“ESTADOS Y DISTRIBUCIÓN ELECTRÓNICA EN SISTEMAS ATÓMICOS Y MOLECULARES. TEORÍA DE MATRICES DENSIDAD REDUCIDAS”



Profesores dictantes:

Roberto Bochicchio
Rosana M. Lobayan

Objetivos:

Introducción a las técnicas de análisis del contenido de las funciones de estado para proveer a interesados en el tema y a alumnos de Doctorado en las áreas de Física, y Química, la posibilidad de iniciarse en el conocimiento de la estructura molecular a partir de la formalización del estudio de sistemas de muchos cuerpos mediante el formalismo de matrices densidad reducidas.

Realización de trabajos de investigación básicos (eventualmente presentables en Congresos) relativos al estudio de sistemas moleculares donde los efectos de correlación electrónica sean de interés

Modalidad de enseñanza:

Clases teóricas y clases Teórico-prácticas

Programa:

Tema 1: Estados del sistema: Estados puros y mezcla. Espacios Hilbert y de Fock. Descripción mediante Matrices Densidad. Sistemas cerrados y abiertos. Modelos de partícula independiente y correlación electrónica.

Tema 2: Tratamiento de sistemas cuánticos de muchas partículas: Introducción a la representación del número de ocupación. Oscilador armónico. Cadenas. Formalismo de la segunda cuantización. Operadores de creación y aniquilación. Algebra de operadores: relaciones de conmutación y anti-conmutación. Representación de operadores. Operadores de 1- y 2-partículas. Operadores Hamiltonianos. Operadores y conservación del número de partículas. Operadores de ocupación y número de partículas. Operadores de excitación. Producto de operadores. Relaciones canónicas de conmutación y para-conmutación. Comparación de los operadores en la 1ra. y 2da. cuantización.

Tema 3: El Spin en la segunda 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.

Tema 4: Funciones de estado determinantes: sus propiedades de spin. Consideraciones generales. Proyecciones de spin. Spin total. Concepto de adaptación de estado (CSF). Acoplamiento de CSFs. Ejemplos. Completitud y ortonormalidad. Transformaciones. Acoplamiento de operadores.

Tema 5: Matrices densidad reducidas: Matrices Densidad Reducidas de 1- y 2-partículas (RDM). Representación matricial y de coordenadas. Contracciones y expansiones. Distribuciones marginales. 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.

Tema 6: Distribuciones electrónicas en sistemas moleculares: Descripciones. Matrices densidad de partículas, de spin, densidades. Descomposición de Lewis de la 1-partícula: apareamiento y

desapareamiento. Estructura de la p-RDMs y huecos. Conceptos cuánticos de la valencia, ordenes de enlace, cargas.

Tema 7: Sistemas con número de partículas no entero: Tratamiento. Ensemble Grand-canónico. Descriptores. Derivadas respecto al número de partículas. Reactividad, potencial químico, electronegatividad.

Tema 8: Partición del espacio inducida por un Sistema Dinámico. Topología de la densidad electrónica. Topología de la Laplaciana de la densidad electrónica.

Destinatarios del curso:

Alumnos de Doctorado en las áreas de Física, Química y Biología, y graduados en Carreras Afines interesados en el tema

Fecha de Inicio:

12/12/2017–09:00hs–Aula Posgrado-FaCENA
Días de dictado: del 12 al 16/12/2017 y del 19 al 23/12/2017 de 09:00 a 18:00 hs

Duración: 35 horas teóricas, 35 horas teórico-prácticas, 20 horas de trabajo no presenciales.

Cupos: mínimo: 10 – máximo: 30

Requisitos de aprobación:

Asistencia mínima del 70%
Presentación de Guías
Aprobación del Trabajo Final

Arancel: Aranceles: \$2.500, con arancel reducido para alumnos de doctorado de \$1.500

Inscripción mediante formulario online:

<http://exa.unne.edu.ar/postgrado/1/inscripcion/formulario.php>

(Se generará un archivo PDF que le servirá de comprobante de inscripción)

Secretaría de Investigación y Posgrado - FaCENA–
2° Piso Edificio Central
Av. Libertad 5400 - Campus
Te: 0379- 4473931 –int.118
Contacto: Mareva Schey
sip.cursos@comunidad.unne.edu.ar