



FACENA

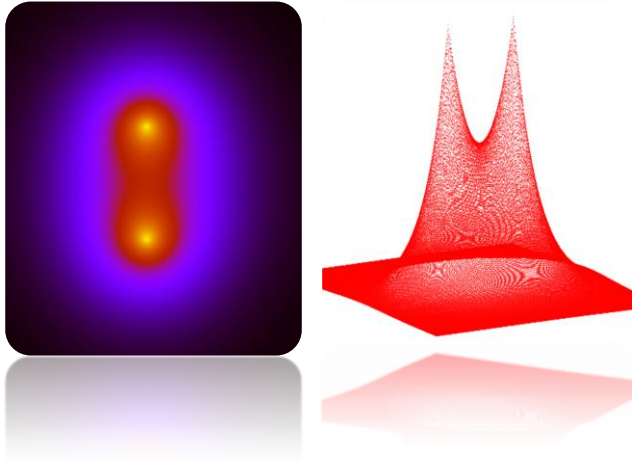
SIP

SECRETARÍA DE
INVESTIGACIÓN Y POSGRADO

FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS Y NATURALES Y AGRIMENSURA
UNIVERSIDAD NACIONAL DEL NORDESTE

CURSO DE POSGRADO

“ESTRUCTURA ELECTRÓNICA MOLECULAR”



PROFESORES DICTANTES:

Dr. Gustavo Adolfo Aucar
Dr Ignacio Agustín Aucar
Dr Diego S. Acosta Coden
Dr Alejandro F. Maldonado

OBJETIVOS:

1. Adquirir destrezas en la manipulación del álgebra de operadores de creación y aniquilación para sistemas complejos, que surgen de la formulación de la Mecánica Cuántica escrita en segunda cuantización.
2. Conocer los fundamentos y aplicaciones de los diferentes métodos desarrollados en los últimos años para la obtención de funciones de ondas de sistemas atómicos y moleculares; así como sus ventajas y desventajas.
3. Aprender sobre los orígenes y la aplicación de funciones de base, atómicas y moleculares, en el cálculo de estructuras electrónicas o de propiedades de diferentes sistemas cuánticos. Comparar, además, los resultados que se obtienen al aplicar distintos tipos de funciones de base.
4. Comprender de manera general la teoría de Funcionales de la densidad (DFT) debido a su amplia aplicación actual.
5. Realizar trabajos de investigación elementales donde se apliquen las técnicas y formalismos a desarrollar durante el curso.

MODALIDAD DE ENSEÑANZA:

La estrategia de enseñanza se basará en clases teórico-prácticas con participación activa de los estudiantes. Se estimulará la discusión de problemas y de los conceptos teóricos impartidos.

Los participantes al curso deberán realizar un trabajo de investigación sobre un tema a convenir.

PROGRAMA:

Primer módulo: Introducción al álgebra de operadores en segunda cuantización. El espacio de Fock. Operadores de creación y aniquilación. Operador número de ocupación. Representación de operadores mono y bi-electrónicos. Matrices densidad. El espín en segunda cuantización. Propiedades. Operadores tensoriales de espín. Transformaciones unitarias.

Segundo módulo: Funciones de onda exacta y aproximada. Características de la función de onda exacta. Método variacional. Teorema de Hellman-Feynman. Expansiones mono y N-electrónicas. Aproximación de Hartree-Fock. Métodos MCSCF, CI, CC, PT.

Tercer módulo: Funciones de base atómicas y moleculares. Funciones de base. Expansiones en uno y varios centros. Funciones angulares y espaciales. Funciones gaussianas. Comportamiento de las funciones de base a distancias pequeñas y grandes del origen. Funciones de base para cálculos Hartree-Fock y correlacionados. Evaluación de integrales atómicas y moleculares.

Cuarto módulo: Métodos de cálculos aproximados. Hartree-Fock: restringido y no restringido. Teorema de Roothaan. Método SCF. CI: truncado y *full*. Parametrización y optimización de la función de onda. Coupled Cluster: características. Energías. Técnicas de optimización. Ecuación de movimiento.

Quinto módulo: Introducción a la teoría de DFT. Teoría básica. Ventajas y desventajas de la teoría DFT. Análisis de algunas funcionales utilizadas en cálculos de propiedades moleculares: Becke; Slater; LDA; BLYP; PBE0.

DESTINATARIOS DEL CURSO: El curso está destinado a Licenciados en Física o Licenciados en Química. En el caso de que asistan alumnos extranjeros el curso se dictará en idioma inglés.

FECHA DE INICIO:

16/11/2017 – 14:30 hs Aula 1 de Física-Campus.

Días de dictado: martes y jueves desde 16 de noviembre al 22 de marzo del 2018.

CARGA HORARIA: 90 horas teórico-prácticas presenciales.

CUPOS: Máximo: 20 (Veinte).

REQUISITOS DE APROBACIÓN:

80% de asistencia, la presentación de un trabajo de investigación y la exposición de una monografía a determinar durante el cursado.

ARANCEL: \$ 300 por alumno. Para doctorandos de FCENA-UNNE el costo será de \$ 150.

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. 118P Contacto: Lic. Ramón Martínez
sip.cursos@comunidad.unne.edu.ar