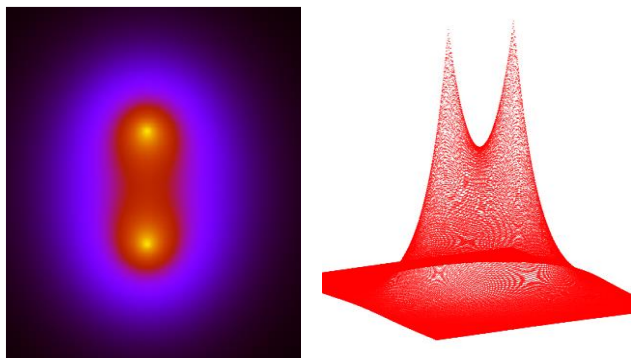


Curso de Posgrado “ESTRUCTURA ELECTRÓNICA MOLECULAR” Resol. N°0946/19D



Docente Responsable y Coordinador

- Dr. Gustavo A. Aucar

Docentes Dictantes:

- Dr. Gustavo Adolfo 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:

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:

Módulo 1: 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.

Módulo 2: 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.

Módulo 3: 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.

Módulo 4: 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.

Módulo 5: 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.

Fecha De Inicio: 05/02/2020 – 10.00hs

Días de dictado: Lunes, Miércoles y Viernes
(horario a confirmar)

Lugar: Aula Seminario de Física

Carga Horaria: 90 horas teórico-prácticas presenciales.

Cupo: Máximo 20 (Veinte)

Requisitos De Aprobación:

80% de asistencia, además de la presentación de un trabajo de investigación y la exposición en seminario.

Arancel: \$ 600 por alumno. Para doctorandos de FCENA-UNNE el costo será de \$ 300.

Inscripciones:

Inscripciones on-line a través del Sistema SIU-Guarani3

<http://www.exa.unne.edu.ar/postgrado/1/index.php?tabla=guarani>

Secretaría de Investigación y Posgrado - FaCENA

2° Piso Edificio Central - Av. Libertad 5400 - Campus

Tel: 0379 - 4473931 – int. 118

Contacto: Lic. Angel E. Barrios Ruiz

sip.cursos@comunidad.unne.edu.ar