

CURSO DE POSGRADO

**TEORÍA CUÁNTICA DE CAMPOS.
SU APLICACIÓN AL ESTUDIO DE LAS
INTERACCIONES ELECTRODÉBILES
EN ÁTOMOS Y MOLÉCULAS**

INFORMACIÓN AMPLIADA

TEORÍA CUÁNTICA DE CAMPOS. SU APLICACIÓN AL ESTUDIO DE LAS INTERACCIONES ELECTRODÉBILES EN ÁTOMOS Y MOLÉCULAS

Tipo de actividad: Curso de posgrado

Denominación: Teoría cuántica de campos. Su aplicación al estudio de las interacciones electrodébiles en átomos y moléculas.

Destinatarios: El curso estará destinado a alumnos que hayan finalizado una licenciatura en Física. En el caso de que asistan alumnos extranjeros el curso se dictará en idioma inglés.

Carga horaria: 96 horas.

Dictado del curso: Desde el 19/11/24

Inscripción: Abierta hasta el 19 de noviembre por SIU GUARANI.

Modalidad: Presencial.

Arancel:

- General: \$5.000

Fundamentación

La aplicación de los conceptos y herramientas desarrollados para el entendimiento y predicción de la dinámica de sistemas atómicos o moleculares en sistemas con un número infinito (numerable) de grados de libertad, es decir, de los “campos” clásicos, se conoce como “teoría cuántica de campos” o QFT por sus siglas en inglés. Su origen temporal es cercano al de la mecánica cuántica y su aplicación ha sido casi exclusiva a la física de partículas elementales hasta hace pocas décadas.

La cuantización de los “campos” hace a que los mismos se puedan entender como compuestos de “cuantos”: los fotones en el caso del campo electromagnético. Estos “cuantos” son los que producen la interacción entre las partículas elementales, los electrones en el caso de la electrodinámica cuántica o QED. Entonces los fotones son los “cuantos” del campo que describen la interacción entre las partículas de materia más comunes denominadas electrones.

TEORÍA CUÁNTICA DE CAMPOS. SU APLICACIÓN AL ESTUDIO DE LAS INTERACCIONES ELECTRODÉBILES EN ÁTOMOS Y MOLÉCULAS

La teoría cuántica de campos más exitosa es la electrodinámica cuántica o QED. Esta teoría ha logrado predecir, por ejemplo, el momento magnético (anómalo) del electrón con una precisión de seis cifras decimales. Su formulación completa data de principios de los años '50. Es la única teoría de campos que permite predecir con suficiente precisión un muy amplio número de fenómenos que cubren desde los espectros atómicos hasta la dispersión, y desde bajas hasta altas energías (de nano a giga electrón- volts).

En años recientes se ha producido un enorme progreso en las investigaciones teórico-experimentales de sistemas atómicos. En particular, de átomos con un número pequeño de electrones y un valor elevado de su número atómico, Z . Esto estimuló la producción de cálculos cada vez más precisos, lo que requiere la inclusión de correcciones de QED y al mismo tiempo la incorporación de interacciones más pequeñas aún debidas a la fuerza débil entre electrones y nucleones. La aplicación de la QED a sistemas electrónicos ligados, como son los electrones en átomos y moléculas, se denomina bound- state QED o electrodinámica cuántica de estados ligados y la teoría que incorpora las interacciones débiles a estos sistemas se conoce como electroweak chemistry.

El objetivo de este curso es brindar las herramientas matemáticas y los conceptos físicos apropiados para el cálculo de propiedades atómicas y moleculares que incluyan los efectos propios de las interacciones electrodébiles. El curso se dividirá en tres partes: a) introducción a la física cuántica relativista y a la teoría cuántica de campos; b) fundamentos de QFT y efectos de QED sobre propiedades atómicas y moleculares; y c) introducción a las interacciones débiles y su aplicación al cálculo de propiedades eléctricas y magnéticas de sistemas atómicos y moleculares.

Contenidos

El curso se dividirá en tres módulos: a) teoría cuántica relativista e introducción a la teoría cuántica de campos; b) Modelos para el tratamiento de los efectos de QED sobre propiedades de respuesta a campos electromagnéticos en átomos y moléculas y c) introducción a las interacciones débiles y al estudio de las propiedades de respuesta del módulo anterior.

Contenidos mínimos:

- A. Primer módulo: Física cuántica relativista y fundamentos de teoría cuántica de campos

TEORÍA CUÁNTICA DE CAMPOS. SU APLICACIÓN AL ESTUDIO DE LAS INTERACCIONES ELECTRODÉBILES EN ÁTOMOS Y MOLÉCULAS

1. Teoría cuántica relativista. Fundamentos
 - a) Dinámica relativista. Formulación Lagrangiana y Hamiltoniana. Covariancia de la electrodinámica. Ecuación de Klein-Gordon.
 - b) Teoría relativista del electrón. Ecuación de Dirac. Interpretaciones.
 - c) Campos externos. Límite no relativista. Campos centrales.
 2. Teoría de campos clásicos y de campos cuánticos basada en la función Lagrangiana. Simetrías y leyes de conservación.
 - a) Campo de Klein-Gordon, real y complejo. Definición del propagador mesónico.
 - b) El campo de Dirac. El propagador fermiónico. Invariancia de gauge e interacción electromagnética.
 3. Cuantización canónica de los campos
 - a) Teoría covariante. Fotones. Cuantización covariante. El propagador fotónico.
 - b) Fermiones. El propagador fermiónico.
- B. Segundo módulo: Tratamiento de los efectos de QED sobre propiedades atómicas y moleculares
1. Correcciones perturbativas y renormalización.
 - a) La matriz de dispersión. Su expansión perturbativa. El teorema de Wick.
 - b) Diagramas de Feynman en el espacio de configuraciones y en el espacio de momentos. Términos de primero y segundo orden de la matriz S. Reglas de Feynman.
 - c) Procesos típicos de QED en el menor orden. Dispersión debida a un campo externo.
 - d) Correcciones radiativas de segundo orden. Auto-energía del fotón y del electrón. Aplicaciones al cálculo del momento magnético anómalo. e) Renormalización.
 2. Diferentes modelos.
 - a) Descripción de Furry. Corrimientos en los niveles de energía. Fórmula de GellMann-Low-Sucher.
 - b) Propagadores fotónicos y electrónicos. Correcciones radiativas.

TEORÍA CUÁNTICA DE CAMPOS. SU APLICACIÓN AL ESTUDIO DE LAS INTERACCIONES ELECTRODÉBILES EN ÁTOMOS Y MOLÉCULAS

- c) Correcciones de autoenergía y polarización del vacío en sistemas atómicos y moleculares. Formulación de Mohr y de Sapirstein.
 - d) Formulación de la función de Green de dos tiempos de Shabaev.
- C. Tercer módulo: Interacciones débiles en átomos y moléculas.
- 1. Modelo estándar. Fuerza débil.
 - a) Teorías de gauge no abelianas. Invariancia y cuantización.
 - b) Introducción a las interacciones débiles.
 - c) Hamiltonianos efectivos.
 - 2. Efectos de interacciones electrodébiles sobre propiedades de respuesta en átomos y moléculas.
 - a) Propiedades intrínsecas. Momento dipolar eléctrico electrónico
 - b) Propiedades eléctricas. Polarizabilidad.
 - c) Propiedades magnéticas. Tensor espín-rotación. Parámetros espectroscópicos de RMN.

Objetivos

- 1. Adquirir los conceptos novedosos que surgen de la teoría cuántica relativista en sistemas ligados y que enriquecen los conocimientos adquiridos en cursos previos sobre la teoría cuántica no relativista.
- 2. Resolver problemas para los que se requiere trabajar con funciones de onda de cuatro componentes; en particular, sus aplicaciones a sistemas atómicos y moleculares.
- 3. Que los alumnos adquieran suficiente entrenamiento en el tratamiento de sistemas cuánticos donde los efectos relativistas no se puedan evitar o son imprescindibles de incluir y que a su vez requieran la inclusión de los efectos de las fuerzas electrodébiles. Los estudiantes deberán haber adquirido suficiente entrenamiento como para consultar textos de teoría cuántica relativista más sofisticados e iniciarse en el entendimiento y estudio de fenómenos físicos que requieran correcciones de mayor orden.
- 4. Que los alumnos realicen trabajos de investigación básicos (en principio presentables en congresos) relativos al estudio de propiedades magnéticas moleculares donde los efectos relativistas y de las interacciones electrodébiles puedan ser importantes.

Metodología de enseñanza

TEORÍA CUÁNTICA DE CAMPOS. SU APLICACIÓN AL ESTUDIO DE LAS INTERACCIONES ELECTRODÉBILES EN ÁTOMOS Y MOLÉCULAS

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

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

Instancias de evaluación y aprobación

Entrega de monografía y defensa final de un trabajo de investigación

Docentes:

- Gustavo A. Aucar. Coordinador y Docente responsable.
- Alejandro F. Maldonado.
- Docente. I. Agustín Aucar. Docente

Bibliografía General

A. Libros:

1. Relativistic Quantum Mechanics of Leptons and Fields. W. T. Grandy. Kluwer. Academic Publisher. The Netherlands. 1991.
2. Introduction to Relativistic Quantum Chemistry. K. G. Dyall y K. Faegri, Jr. Oxford university press. Oxford. 2007.
3. Relativistic Quantum Chemistry. The Fundamental Theory of Molecular Science. M. Reiher y A. Wolf. Wiley-VCH. Weinheim. 2009.
4. Handbook of Relativistic Quantum Chemistry. W. Liu editor. Springer. 2017.
5. Quantum Field Theory. C. Itzykson y J-B Zuber. McGraw-Hill. 1980.
6. Quantum electrodynamics. W. Greiner y J. Reinhardt. Springer. Third edition. 2003.
7. Field quantization. W. Greiner y J. Reinhardt. Springer. 1996.
8. An introduction to quantum field theory. M. E. Peskin y D. V. Schroeder. CRC Press. 1995.

B. Artículos:

TEORÍA CUÁNTICA DE CAMPOS. SU APLICACIÓN AL ESTUDIO DE LAS INTERACCIONES ELECTRODÉBILES EN ÁTOMOS Y MOLÉCULAS

1. S. G. Karshenboim. Precision physics of simple atoms: QED tests, nuclear structure and fundamental constants. *Phys. Rep.* 422, 1-63 (2005).
2. V. M. Shabaev. Two-time Green's function method in QED of high-Z few- electron atoms. *Phys. Rep.* 356, 119-228 (2002).
3. I. Lindgren et al. MB-QED perturbation theory: connection to the two-electron Bethe Salpeter equation. *Can. J. Phys.* 103, 1-35 (2005).
4. G. A. Aucar, R. H. Romero y A. F. Maldonado. Polarization propagators: A powerful theoretical tool for a deeper understanding of NMR spectroscopic parameters. *Int. Rev. Phys. Chem.* 29, 1-64 (2010).
5. P. Pyykkö The physics behind chemistry and the Periodic Table. *Chem Rev.* 112, 371-384 (2012).
6. M. S. Safronova y otros. Search for new physics with atoms and molecules. *Rev. Mod. Phys.* 90, 25008 (2018).
7. R. Berger y J. Stohner. Parity violation. *WIREs Comput. Mol. Sci.* e1396 (2018).
8. K. Koziol, I. A. Aucar y G. A. Aucar. Relativistic and QED effects on NMR magnetic shielding constant of neutral and ionized atoms and diatomic molecules. *J. Chem. Phys.* 150, 184301 (2019).