

TÍTULO: Electrónica molecular			
AÑO: 2020	CUATRIMESTRE: 2°	N° DE CRÉDITOS: 3	VIGENCIA: 3 años
CARGA HORARIA: 60 horas de teoría y 20 horas de práctica			
CARRERA/S: Doctorado en Física			

FUNDAMENTOS

En términos conceptuales en este curso se busca aprender a aplicar a problemáticas de la práctica contemporánea los conceptos formales que son desarrollados en los cursos de mecánica cuántica, termodinámica y mecánica estadística para explicar propiedades de la física molecular y macromolecular que impactan en las tecnologías actuales.

OBJETIVOS

El transporte electrónico a través de moléculas confinadas entre dos electrodos se está convirtiendo en un activo campo de investigación dentro de la física y la química, con aplicaciones a la electrónica y a la electroquímica. El curso desarrollará los aspectos conceptuales y cualitativos de la física atómica y molecular para una comprensión cualitativa y cuantitativa de los problemas de este campo. En este sentido, este curso es complementario con los cursos de mecánica cuántica dictados en las carreras de grado en física y en química. Por tanto es apto tanto para graduados de física y química ya que busca construir un lenguaje común para abordar este campo interdisciplinario.

PROGRAMA

Unidad I: Átomos y moléculas.

Átomos simples y multi-electrónicos. Desarrollo histórico. Aproximación de campo medio de Hartree. Estructura electrónica de moléculas simples. Resolución de la ecuación de Schrödinger estacionaria de átomos y moléculas. Orbitales híbridos y simetrías. Aproximación de Hückel. Modelos tight-binding de Harrison. Representación de Orbitales Moleculares de los distintos tipos de enlace. Compuestos orgánicos. Campo ligante y campo cristalino. Sistemas con doble enlace conjugado. Anilinas. Complejos.

Unidad II: Macromoléculas y sólidos

Simetrías. Orbitales colectivos. Polímeros. Polietileno y poliacetileno. Teoría de bandas. Nanotubos de carbono. Grafeno. Estados superficiales localizados. Estados de defectos. Decaimiento de excitaciones localizadas. Regla de oro de Fermi.

Unidad III: Cinética electrónica y cinética química

Reacciones concertadas de Woodward y Hoffman. Ejemplos de aplicación: reacciones fotoquímicas térmicamente activadas. Reglas de Diels Alder. Papel de los complejos metálicos. Resolución de moléculas metal-orgánicas y polímeros. Funciones de Green para sistemas periódicos. Estructura electrónica de C60 y nanotubos. Modelos para representar los electrodos. Catálisis heterogénea.

Unidad IV: Excitaciones y su función respuesta: funciones de Green.

Otras excitaciones elementales. Fonones y estados vibrónicos. Poliacetileno y anomalía de Kohn y transición de Peierls. Solitones. Polarones. Excitones. Soluciones estacionarias en sistemas múltiplemente conexos abiertos: Resonancias y anti-resonancias. Reacciones de transferencia electrónica y conductancia de Landauer.

Unidad V: Aplicaciones

Dinámica de electrones. Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. Velocidades de grupo y de fase. Escalera de Wannier. Oscilaciones de Bloch. Modelos de transferencia electrónica en sistemas fotosintéticos. Formulación de Marcus. El problema del tiempo de tunelamiento. Los fonones como fuente de decoherencia.

Unidad VI: Mecánica cuántica de sistemas abiertos.

Estadísticas y potenciales químicos. Condiciones de contorno. Modelos de ambientes. Decoherencia. Sistemas caóticos clásicos. Ecuación de Boltzmann. Transporte de carga y energía. Decoherencia en formulación de Landauer-Büttiker. Modelo D'Amato-Pastawski. Aproximación de Hückel. Modelos tight-binding de Harrison. Espacio de Fock y formalismo de Floquet en sistemas abiertos. Conexión con la formulación de Kadanoff-Baym-Keldysh.

Unidad VII: Herramientas físico-matemáticas

A lo largo del curso serán introducidas ideas intuitivas y de valor práctico. Resolución numérica de la ecuación de Schrödinger. Matriz de promoción. Representación de enlaces fuertes (tight-binding). Simetría orbital y reglas de selección. Funciones de Green. Representación espectral. Ecuación de Dyson. Potenciales efectivos. Diagramas de Feynman. Relación con matrices de scattering, de promoción y de transferencia. Límite semiclásico de la mecánica cuántica. Sistemas multielectrónicos y segunda cuantificación. El gas de electrones y la aproximación de Hartree-Fock. Se hará énfasis en los ingredientes cualitativos.

PRÁCTICAS

Se desarrollarán problemas para solución analítica y numérica usando los programas que resulten más familiares a los estudiantes; Fortran, Matlab, Mathematica, Maple o Python.

BIBLIOGRAFÍA

Applied Quantum Mechanics. Walter Harrison. World Scientific 2000
Molecular Electronics. Ari Aviram and Mark Ratner, NewYorkAcad.Sc. (1998)
Electronic Transport in Mesoscopic Systems Supriyo Datta. Cambridge UP (1996)
Tight Binding methods in quantum transport through molecules and small devices: from the coherent to the decoherent description H.M.Pastawski and E. Medina , Rev. Mex. Física 47 supp.1 (1-23) (2001)
A Guide to Feynman diagrams in the Many-Body problem R.Mattuck, Dover (1993)
Molecular dissociation in presence of a catalyst: A.Ruderman,A.D.Dente, E.Santos and H.M.Pastawski
I. Interpreting bond breaking as a quantum dynamical phase transition
J. Phys.Condens. Matt 27 315501 (2015); <http://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/27/31/315501>
II. The bond breaking role of the transition from virtual to localized states
Mater. Res. Express 3 (2016) 085017 doi:10.1088/2053-1591/3/8/085017
Artículos originales varios.

MODALIDAD DE EVALUACIÓN

Dos exámenes parciales y un examen final consistente en un problema avanzado y la exposición de tu artículo reciente.

REQUERIMIENTOS PARA EL CURSADO

Licenciatura en Física, Química o disciplina afin donde se hayan introducido conceptos de mecánica cuántica y mecánica estadística.

