



Universidad Nacional de Córdoba
FACULTAD DE MATEMÁTICA ASTRONOMÍA Y FÍSICA



UNIVERSIDAD NACIONAL DE CÓRDOBA
Facultad de Matemática, Astronomía y Física

PROGRAMA DE CURSO DE POSGRADO

TÍTULO: Electrónica Molecular	
AÑO: 2012	CUATRIMESTRE: 1ero
CARGA HORARIA: 60 hs	No. DE CRÉDITOS:
CARRERA/S: Doctorado en Física, Doctorado en Química y carreras relacionadas las nanociencias.	
DOCENTE ENCARGADO: Dr. Horacio Pastawski, Colaboradora: Dra. Patricia Levstein	

PROGRAMA
<p>Objetivos: Es un curso de apunta al entendimiento de procesos de transferencia electrónica y conductividad eléctrica en moléculas y dispositivos nanoscópicos. Se desarrollan los conceptos básicos de estructura electrónica molecular y mecanismos de transporte. Sin descuidar una descripción fenomenológica se pretende brindar una introducción a los métodos de cálculo formales.</p> <p>Requerimientos: Termodinámica y Mecánica Estadística I , Mecánica Cuántica I y un curso de Introductorio sobre Física Moderna o Físico-Química.</p> <p>Programa :</p> <p>1. Motivaciones y conceptos básicos (Fenomenología): Dispositivos de Aharonov-Bohm, Microscopio de efecto Túnel (MET). Heteroestructuras semiconductoras. Bases Cuánticas. Ecuación de Schrödinger. Descripción de Feynman. Densidad de Estados. Teoría de Perturbaciones vs. Soluciones exactas. Estados atómicos. Momentos angulares. Aproximación de Hartree-Fock.</p> <p>2. Estructura Molecular: Efecto Stark y orbitales híbridos. Campo cristalino y campo ligante. Simetrías.</p>



Enlace covalentes e iónicos. Aproximación de Huckel. Relación con modelos de Electrón libre (*a la* Harrison). Cuantificación. Covalencia y teoremas espectrales. Descripción de sistemas de doble enlace. **Funciones de Green.** Funciones de Green de una partícula. Representación Espectral. Ecuación de Dyson. Potenciales efectivos. Diagramas de Feynman.

3. Orbitales de Frontera y reactividad:

Propuesta de Woodward y Hoffman. Simetrías en los orbitales moleculares. Cicloadiciones. Ejemplos. Catálisis.

4. Conductores unidimensionales:

. Inestabilidad de Peierls. Solitones en Poliacetileno. Nivel de Fermi y dopaje. Conductores homogéneos.

5-Dinámica Cuántica:

Métodos de decimación. Resonancia y antiresonancia. Solución dinámica de la Ecuación de Schrödinger. Constante cinética transferencia electrónica. Tiempo de tunneling.

Reloj de Larmor. Interacción Ferromagnética. Superintecambio.

6- Metodos Avanzados:

Funciones de Green. Significado y evaluación de las auto-energías. Diagramas de Feynman. Densidad de estados superficial. Límite termodinámico. Ejemplos. Adsorbato en un metal. Estados localizados de Tamm. Modelos de Weaire-Thorpe. Estados localizados de Schotkley.

7-Nanopartículas y agregados:

Dimensión fractal. Estructura electrónica en topogías complejas. Dimensión fractal polaca.

8-Formalismos de Transporte:

Efectos del campo eléctrico. Oscilaciones de Boch-Wannier. Ecuación de Boltzmann. Ideas de Landauer.

9- Alambres moleculares:

Soluciones exactas. Defectos Topológicos. Más allá del transporte coherente. Modelo D'Amato-Pastawski. Decoherencia. Modos polarónicos. Emisión de cuantos vibracionales. Aplicaciones a transporte en DNA. Espectroscopía inelástica.

7. Respuesta No-lineal:

Sistemas lejos de Equilibrio. Breve introducción al formalismo de Keldysh-Kadanoff y Baym. Expansión diagramática. Fenómeno de tunelamiento. Régimen de Bloqueo de Coulomb. Efecto Kondo en MET. Diodos Láser. Dispositivo emisor de ultrasonido: SASER. Efectos dinámicos.



BIBLIOGRAFÍA

"*Molecular Quantum Mechanics*" P. W. Atkins and R. S. Friedman (3rd Ed.) Oxford U. P.

"*Electronic Transport in Mesoscopic Systems*" Supriyo Datta, Cambridge U. P. (1995)

"*A Guide to Feynman diagrams in the Many Body problem*" Richard Mattuck, (Reimpresion Dover (1993)
Willey and Sons (1963)

Quantum Kinetics In Transport and Optics of Semiconductors. H. Haug and A. P. Jauho, Springer Verlag

Molecular Electronics, Science and Technology. Editors Ari Aviran and M. Ratner. Annals of the New York Academy of Sciences vol. 852.

Processes in Molecular Wires. Special issue of Chemical Physics. Vol 281, 2-3 (2002)
Guest editors P. Hanggei, M. Ratner an S. YalirakiChemical Physics.

Artículos originales varios: formalismo Landauer-Buttiker, Transporte en alambres, SASER, etc.

MODALIDAD DE LA EVALUACIÓN

Examen escrito consistente en la resolución de problemas y posterior entrevista oral para profundizar en el los conceptos involucrados.