

Curso de Posgrado

FaMAF-2017

Electrónica Molecular

Período: 2do semestre 2017.

Responsable: Dr. Horacio M Pastawski

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. El curso desarrollará los conocimientos básicos necesarios de la física atómica y molecular para una comprensión cualitativa y cuantitativa de los problemas de este campo. Este curso es apto tanto para estudiantes de Física y Química ya que busca construir un lenguaje común para abordar este campo interdisciplinario.

Requerimientos: Los alumnos de Licenciatura en Física deberán acreditar el nivel mínimo de Mecánica Cuántica, Termodinámica y Mecánica Estadística. Estudiantes de Doctorado en Física con conocimientos de Teoría de Campos tendrán también oportunidad de extender y profundizar sus conocimientos en esta área.

Duración: 80 horas de clases teóricas y resolución de problemas.

Evaluación: Alumnos de grado: dos exámenes parciales y examen final integrador con problemas a nivel del curso.

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

Programa :

1. Estructura electrónica de moléculas. Resolución de la ecuación de Schrödinger estacionaria en la Representación de Orbitales Moleculares de los distintos tipos de enlace. Campo ligante y campo cristalino. Complejos.
2. Reacciones concertadas de Woodward y Hoffman. Ejemplos de aplicación. Papel de los complejos metálicos. Resolución de moléculas metal-orgánicas y polímeros. Estructura electrónica de C60 y nanotubos. Modelos para representar los electrodos.
3. Otras Excitaciones Elementales. Fondones 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.
4. 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.

5. Decoherencia. Modelos de ambientes. Sistemas Caóticos clásicos. El límite semiclásico. Impredictibilidad de la fase cuántica. Consecuencias del caos en la coherencia de fase. Los fonones como fuente de decoherencia.

6. Mecánica Cuántica de Sistemas Abiertos. Condiciones de contorno. Estadísticas. Ecuación de Boltzmann. Transporte de carga y energía. Sistemas Finitos formulación de Landauer. Formalismo de Keldysh.

7. Respuesta a perturbaciones: Regímenes Lineal y No-lineal. Relaciones de Kramers-Kronig. Espectroscopia vibracional. Puntos Cuánticos. Bloqueo de Coulomb. Interruptor eléctrico. Dispositivos electromecánicos.

Temas Físico-matemáticos que se desarrollarán en los capítulos: 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. Extensión de los conceptos anteriores a sistemas de muchas partículas. Función de Apantallamiento y la Aproximación de Fase Aleatoria (RPA). Propagador de Polarización. Líquidos de Fermi.

Bibliografía.

"Applied Quantum Mechanics". Walter Harrison. World Scientific 2000

"Molecular Electronics" Arri Aviram and Mark Ratner, The New York Academy of Sciences (1998)

"Electronic Transport in Mesoscopic Systems" Supriyo Datta. Cambridge Univ. Press (1996)

"Tight Binding methods in quantum transport through molecules and small devices: from the coherent to de 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" Richard Mattuck, Dover (1993)

Artículos originales varios.