



UNC

Universidad
Nacional
de Córdoba



FAMAF

Facultad de Matemática,
Astronomía, Física y
Computación

EXP-UNC: 38074/2017

Res. CD N°265/2017

PROGRAMA DE ASIGNATURA	
ASIGNATURA: Electrónica Molecular	AÑO: 2017
CARACTER: Especialidad	UBICACIÓN EN LA CARRERA: 4° año 2° cuatrimestre
CARRERA: Licenciatura en Física	
REGIMEN: Cuatrimestral	CARGA HORARIA: 120 horas

FUNDAMENTACIÓN Y OBJETIVOS

Este curso está dirigido a los estudiantes que se inician en los tópicos avanzados de la Física y pretende cubrir conceptos básicos de propiedades electrónicas, tanto estructurales como de transporte, en los sistemas moleculares y dispositivos electrónicos que permitan iniciar los trabajos de investigación. Se presentan y aplican los conceptos cuánticos para entender la estructura de moléculas y la propagación de excitaciones cuánticas en estructuras moleculares y nano-dispositivos electrónicos. Todos los conceptos cuánticos y estadísticos que se usan son presentados en el curso. Los tópicos desarrollados pueden resultar de utilidad para quienes se orienten a desarrollar investigación en: Información Cuántica, Espectroscopia, Física del Sólido, Resonancia Magnética, Energías no convencionales y electroquímica, Campos Cuánticos y Relatividad Cuántica, Fotosíntesis, etc. En cuanto sea posible, el énfasis de los distintos tópicos se adaptará los campos de investigación de cada uno de los alumnos, principalmente a través de problemas de resolución individual.

Fundamentación: En términos conceptuales este curso se aplican los conceptos desarrollados en los cursos de Mecánica Cuántica, Termodinámica y Mecánica estadística para explicar propiedades de la Materia Condensada que impactan en las tecnologías actuales. Es conveniente, pero no imprescindible, un curso introductorio en Física del Estado Sólido. Dado que focaliza en tópicos de aplicación, se considera apta para ser tomada como una primer materia de especialidad.

Objetivos: Propósito del curso:

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 como de Química ya que busca construir un lenguaje común para abordar este campo interdisciplinario. Por otra parte a lo largo del curso se tomará contacto con temas Físico-matemáticos de relevancia para la física actual: Hamiltonianos "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.

CONTENIDO

Unidad 1

Ideas centrales de Mecánica Cuántica. Integrales de Camino. Ecuación de Schrödinger discreta. Densidad de Estados. Aplicaciones del teorema de Oscilación. Sistemas multidimensionales y multipartícula.

Unidad 2

Ideas sobre 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.

(Handwritten signature)



UNC

Universidad
Nacional
de Córdoba



FAMAF

Facultad de Matemática,
Astronomía, Física y
Computación

EXP-UNC: 38074/2017

Res. CD N°265/2017

Unidad 3

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.

Unidad 4

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.

Unidad 5

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.

Unidad 6

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.

Unidad 7

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.

Unidad 8

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

BIBLIOGRAFÍA

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

- "Applied Quantum Mechanics". Walter Harrison. World Scientific 2000 ISBN 9810243758
- "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 , Revista Mexicana Física 47 supp.1 (1-23) (2001)
- "Quantum Transport: Atom to Transistor", Supriyo Datta, Cambridge (2006)

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

- "A Guide to Feynman diagrams in the Many-Body problem" Richard Mattuck, Dover (1993)
- Artículos originales varios.

EVALUACIÓN

FORMAS DE EVALUACIÓN

- El examen final contará de una evaluación oral expositiva de un tema central a partir del cual se explorarán los conceptos desarrollados en el curso.
- Se propondrán el desarrollo exhaustivo de problemas de nivel pre-investigación que contengan elementos originales.

REGULARIDAD



Universidad
Nacional
de Córdoba



FAMAF
Facultad de Matemática,
Astronomía, Física y
Computación

EXP-UNC: 38074/2017

Res. CD N°265/2017

En acuerdo a lo establecido en la Ordenanza 4/2011, "El alumno deberá:

- Cumplir un mínimo de 70% de asistencia a clases teóricas, prácticas, o de laboratorio.
- La asistencia se complementará con la aprobación de los problemas resueltos.

PROMOCIÓN

No hay régimen de promoción.

CORRELATIVIDADES

Para cursar: Mecánica Cuántica I (regularizada)

Para Rendir: Mecánica Cuántica I (aprobada)