

EX-2025-00605471- -UNC-ME#FAMAF

| PROGRAMA DE ASIGNATURA | |
|---|--|
| ASIGNATURA: Electrónica Cuántica Molecular | AÑO: 2025 |
| 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 y magnéticas, 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 sucintamente introducidos y discutidos en el curso. Los tópicos desarrollados pueden resultar de utilidad para quienes se orienten a desarrollar investigación en: Información Cuántica, Espectroscopias, Física del Sólido, Resonancias Magnéticas, Energías no convencionales, 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: Los nuevos dispositivos electrónicos y procesos electroquímicos avanzados requieren de un aprovechamiento de las propiedades cuánticas de la materia. 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. Para ello se necesita una visión integradora de la descripción molecular que excede los conocimientos técnicos usualmente desarrollados en los cursos de Mecánica Cuántica, Mecánica Estadística y Física del Sólido, o bien en un curso de Física Moderna. Esto hace necesario focalizar en los conceptos que impactan en los novedosos dispositivos electrónicos y magneto-ópticos basados en efectos cuánticos y en los procesos fisicoquímicos más actuales. Para ello se deben proveer las herramientas básicas (analíticas y computacionales) que permitan su aplicación práctica.

OBJETIVOS: Propósito:

Se busca integrar en forma concreta los conceptos de la física atómica y molecular para una comprensión cualitativa y cuantitativa de los problemas del transporte de carga, espín y otras excitaciones en dispositivos nanoscópicos y moleculares. Esto permitirá construir un camino conceptual desde la mecánica cuántica hasta los observables macroscópicos. 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, de una manera simple y constructiva, se tomará un primer contacto con temas físico-matemáticos de relevancia para la física actual que pueden ser discutidos dentro de una formulación de Hamiltonianos 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 Dispersión (scattering), de Promoción y de Transferencia. Límite semi-clásico de la Mecánica Cuántica. Sistemas multi-electrónicos y Segunda cuantificación. El gas de Electrones y la aproximación de Hartree-Fock. En base a la extensión de los conceptos anteriores a sistemas de muchas partículas se introducen en forma muy sucinta: Función de Apantallamiento y la Aproximación de Fase Aleatoria (RPA). Propagador de Polarización. La profundidad de cada uno de los temas se adapta a la formación individual e intereses de los alumnos.

CONTENIDO

Propiedades Cuánticas de Sistemas Multielectrónicos.

Ideas centrales de Mecánica Cuántica. Integrales de Camino. Ecuación de Schrödinger discreta. Densidad de Estados. Aplicaciones del teorema de Oscilación. Sistemas multidimensionales y su reducción dimensional basada en simetrías. Átomos multielectrónicos. Aproximación de Hartree-Fock.

Métodos avanzados de moléculas y macromoléculas.

Ideas sobre estructura electrónica de moléculas como Combinación Lineal de Orbitales Atómicos (LCAO). Campo ligante y campo cristalino. Complejos. Resolución de la ecuación de Schrödinger estacionaria en la Representación de Orbitales Moleculares de los distintos tipos de enlace. Resolución de sistemas moleculares específicos. Hamiltoniano efectivo y función de Green. Ecuación de Dyson. Auto-energías. Diagramas de Feynman. Expansión en Fracciones continuas y estrategias de cálculo recursivas. Regla de Oro de Fermi en átomos adsorbidos. Estados localizados de Schottky y de Tamm. Electrodo y sistemas abiertos.

Electrones en Moléculas y Electrodo

Reacciones concertadas de Woodward y Hoffman. Átomos y Moléculas Adsorbidos en Superficies. Catálisis Heterogénea. Ejemplos de aplicación. Resolución de moléculas metal-orgánicas y polímeros. Estructura electrónica de C60 y nanotubos. Modelos para representar los electrodos.

Transporte estacionario de excitaciones.

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. Hamiltonianos no-Hermíticos y transiciones de fase en la dinámica cuántica.

Dinámica de Excitaciones Cuánticas.

Dinámica de Electrones. Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. Velocidades de grupo y de fase. Escalera de Wannier. Oscilaciones de Bloch.

Decoherencia y el problema del ambiente.

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.

Base de una Formulación Teórica para la Decoherencia.

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

Aplicaciones Avanzadas.

Respuesta a perturbaciones: Regímenes Lineal y No-lineal. Modelos de transferencia electrónica en sistemas fotosintéticos. Formulación de Marcus. El problema del tiempo de tunelamiento. Relaciones de Kramers-Kronig. Espectroscopia vibracional. Puntos Cuánticos. Bloqueo de Coulomb. Dispositivos electromecánicos.

BIBLIOGRAFÍA

BIBLIOGRAFÍA BÁSICA

"Un camino oscilatorio a la Mecánica Cuántica".

H. M. Pastawski. libro en preparación disponible en

https://drive.google.com/drive/folders/129UTXxYj72rBifFKRAL3PIV0964hBF72?usp=share_link

EX-2025-00605471- -UNC-ME#FAMAF

"Applied Quantum Mechanics". Walter Harrison. World Scientific 2000 ISBN 9810243758

"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 de Física 47 supp.1 (1-23) (2001)

"Quantum Transport: Atom to Transistor",
Supriyo Datta, Cambridge U. Press (2006)

"Electron-Phonon interaction and electronic decoherence in molecular conductors."
H. M. Pastawski, L. E. F. Foa Torres, E. Medina
Chem. Phys. 281/2-3 pp. 257-278 (2002)

"Introduction to Graphene-Based Nanomaterials: From Electronic Structure to Quantum Transport"
2nd Edition
by Luis E. F. Foa Torres, Stephan Roche, Jean-Christophe Charlier
Cambridge U. Press (2020)

BIBLIOGRAFÍA COMPLEMENTARIA

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

Artículos originales varios, en particular aquellos desarrollados con alumnos de dictados anteriores.

Molecular dissociation in the presence of catalysts: interpreting bond breaking as a quantum dynamical phase transition

A Ruderman, A D Dente, E Santos and H M Pastawski

J. Phys. Condens. Matter 27 315501 (2015);

<http://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/27/31/315501>

-Simulating a catalyst induced quantum dynamical phase transition of a Heyrovsky reaction with different models for the environment.

F. Lozano.Negro, M. A. Ferreyra-Ortega, D. Bendersky, L. Fernández-Alcázar y H. M. Pastawski

J. Phys. Condens. Matt. 34 214006 (2022)

<https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1361-648X/ac57d6>

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 propondrá el desarrollo exhaustivo de problemas tipo discutidos previamente en clase, enfatizando en el análisis cualitativo de los resultados analíticos y numéricos que ponga en relevancia los conceptos físicos involucrados.

REGULARIDAD

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 del 60% los Trabajos Prácticos (problemas de resolución analítica y computacional),

CORRELATIVIDADES

Para cursar:

regularidad en Mecánica Cuántica I y Termodinámica Mecánica Estadística I (LF) o en Física Moderna (PF).

Para rendir: aprobada Mecánica Cuántica I (LF) o Física Moderna (PF).