

# ESTRUCTURA DE LA MATERIA 3

Curso de Verano 2006

Horacio Grinberg

## I. Ecuación de Schrödinger y Algebra de Operadores

Ecuación de Schrödinger. Matrices densidad. Teorema del virial. Aplicaciones a sistemas de muchas partículas. Representaciones matriciales. Operadores normales. Valores de expectación. Operadores proyección.

## II Método Variacional

Bases del método. Unidades atómicas. Tratamiento variacional de la molécula ión hidrógeno  $H_2^+$ .

## III Aproximación de Born Oppenheimer

Separación de los movimientos electrónico y nuclear. Estados electrónicos del ión  $H_2^+$ .

## IV Principio de Antisimetría y Spin del Electrón

Operadores de spin. Relaciones de ortogonalidad de las funciones de spin. Representaciones matriciales.

## V Modelo de Partícula Independiente

Producto de Hartree y determinantes de Slater. Valores de expectación de operadores con respecto a autofunciones determinantaes. Energía del estado fundamental del átomo de He. Efecto de la repulsión electrónica sobre las energías atómicas. Scaling y teorema del virial. Aplicación a moléculas diatómicas. Fuerzas en moléculas. Teorema generalizado de Hellmann-Feynman.

## VI Configuraciones de Spin Adaptadas

Determinantes restringidos y configuraciones de spin adaptadas. Estados excitados del átomo de He. Derivación analógica del operador  $S^2$  en sistemas multielectrónicos. Uso de operadores proyección para la construcción de autofunciones determinantaes del operador  $S^2$ . Autofunciones de spin de un sistema de tres electrones. Ejemplo de cálculo.

## VII Formalismo del Número de Ocupación

Autofunción en el formalismo de segunda cuantización. Reglas de anticonmutación de operadores fermiónicos de creación y aniquilación. Estados de referencia y antisimetría. Representación de operadores dinámicos. Ejemplos. Estados de Hartree-Fock. Elementos de matriz entre autofunciones determinantaes. Elementos de matrices densidad. Transformaciones de bases.

## VIII Método de Hartree-Fock

Minimización de la energía de un determinante de Slater. Ecuaciones canónicas de Hartree-Fock. Interpretación de la autofunción de Hartree-Fock. Teorema de Koopman. Expansión del conjunto de base. Restricciones en el método de Hartree-Fock. Método de Hartree-Fock restringido. Sistemas de capa cerrada. Ortogonalización de la base. Extensiones del método de Hartree-Fock. Métodos generalizados de Hartree-Fock. Métodos no restringidos. Cálculo de propiedades. Propiedades de las autofunciones de Hartree-Fock.

## IX Método de Interacción de Configuraciones

Autofunción de interacción de configuraciones. Expansiones en términos de funciones determinantaes. Análisis de las ecuaciones de interacción de configuraciones.