



Física
FACULTAD DE CIENCIAS
FÍSICAS Y MATEMÁTICAS
UNIVERSIDAD DE CHILE

FI-5003 Coloquio: Uso de Simetrías en Mecánica Cuántica

(Colloquium: Using Symmetries in Quantum Mechanics)

Prof. Jaime Röessler Bonzi

5 U.D.

(Un mini-curso abreviado de “Teoría de Grupos”, con aplicaciones a átomos, moléculas y sólidos)

Requisito: FI-4001 Mecánica Cuántica.

Tabla de Contenidos (no necesariamente ordenados temporalmente)

1- Breve Introducción a Teoría de Grupos. Algunos Grupos Geométricos. El “Teorema de Platón” y los grupos puntuales en dimensión 3; grupos puntuales cristalinos. Clases de equivalencia. Representaciones de grupos; núcleo de una representación. Representaciones irreducibles. Gran Teorema de Ortogonalidad. Tabla de Caracteres de representaciones Irreducibles. Proyectores. La idea es dedicarle poco tiempo a la parte matemática, la que por tanto no será demasiado formal. En especial, se omitirá todo lo referente a “Grupos de Lie”, constantes de estructura y métrica del grupo, operadores de Casimir,...

2- Simetrías en Mecánica Cuántica; la idea guía “Toda la degeneración del Espectro Discreto debería explicarse por simetrías”, y la asociación de espacios de degeneración a Representaciones Irreducibles (RI). *Contrariamente al enfoque tradicional de un curso de Teoría de Grupos, la idea es describir las “Representaciones Irreducibles” en término de las funciones bases asociadas, ligando inmediatamente las RI a ejemplos físicos.*

3- Estudio de algunos ejemplos simples: El grupo cíclico y sus RI; aplicación a Moléculas cíclicas y cristales; el Teorema de Bloch; estados de Wannier. Proyectores sobre pseudomomentos y la aproximación “Tight Binding” de la Física del Sólido.

4- Moléculas Lineales; orbitales σ , π , δ ,... El caso con simetría de inversión. Moléculas de C_2 , O_2 , N_2 ,...

5- Breves consideración sobre el “Principio de Pauli” y el spin total de átomos y moléculas. El paramagnetismo del O_2 .

6- Complejos de Metales de Transición; el caso de complejos octaédricos y el grupo Octaédrico; niveles E_g y T_{2g} y su ordenamiento en energía. Campos moleculares (o cristalinos)

fuertes y débiles, y el Spin total asociado (moléculas magnéticas y no-magnéticas).

Aplicaciones: Un ejemplo de Geología y Física de altas presiones; la hemoglobina y su funcionalidad; colorantes. Distorsiones Jahn-Teller.

7- Átomos. El átomo de Hidrógeno y su mal llamada “degeneración accidental”; el Operador de Runge-Lenz. Átomos poli-electrónicos, con énfasis en el caso de la configuración $(np)^2$, y su spin asociado.

7- Aplicaciones a “Teoría de Bandas”. Las aproximaciones “Electrones cuasi-libres” (NFE) y “Tight Binding” (TB). Estados “bonding” en los fondos de banda, y “antibonding” en las cumbres. Estudio de TB en cristales cúbicos. Bandas del Grafeno, Cobre y Aluminio. Algunos de estos últimos tópicos podrían ser trabajos finales de los alumnos.

El curso se evaluará en base a tareas y un “trabajo final”. Duración del curso: 7 a 8 semanas (desde inicios del año académico, cerrando hacia el 4 de Mayo). Puede que algunos temas se vean muy someramente, o se omitan del todo; acaso ello se decida en función del interés del los alumnos.

Semestre Otoño, Año 2015.-