

# COLOQUIO DE $\Phi$ ÍSICA

UNIVERSIDAD DEL VALLE  
Departamento de Física &  
Posgrado en Ciencias-Física



*Semestre II de 2013*

## ***Celebración 50 años de la Creación del Depto. de Física***

*Cerrando la Brecha entre la Física y la Química*

*Dr. Julio César Arce*

*Grupo de Química Teórica y Computacional  
Departamento de Química, Universidad del Valle*

Octubre 17 de 2013, 11:00 AM, Auditorio Calima  
Edificio de Ciencias Naturales y Exactas

*Ver resumen en la Página Siguiente*

## **Cerrando la Brecha entre la Física y la Química**

**Julio César Arce**

*Grupo de Química Teórica y Computacional, Departamento de Química, Universidad del Valle*

En este seminario ilustraré, tomando ejemplos de trabajos realizados en nuestro grupo, cómo ideas originadas separadamente en los contextos de la física y de la química pueden converger fructíferamente para ambas ciencias. Específicamente, me referiré a dos amplias líneas de investigación: el control de las propiedades electrónicas de sistemas nanoscópicos y la mecánica cuántica condicional. El propósito general de la primera línea es el lograr el control de las propiedades electrónicas de sistemas moleculares, supramoleculares y en estado sólido de tamaños nanométricos. Mostraré métodos que hemos desarrollado para el cálculo de los estados electrónicos, esquemas que hemos propuesto para el control intrínseco o extrínseco, por medio de campos magnéticos y electromagnéticos, de las propiedades electrónicas, y posibles aplicaciones en la electrónica, la optoelectrónica, el cómputo cuántico y el sensado químico. El objetivo básico de la segunda línea es desarrollar un formalismo, y la interpretación asociada, de la mecánica cuántica basándose en la factorización marginal-condicional de la función de onda de un sistema bipartito, la cual se puede considerar como una “exactificación” de la aproximación de Born-Oppenheimer. Hemos introducido una interpretación condicional de la función de onda dependiente del tiempo y, con base en ella, hemos demostrado que la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo se puede deducir, bajo ciertas condiciones, a partir de la independiente del tiempo. También hemos mostrado que tal factorización se puede emplear para la solución formalmente exacta del problema de tres cuerpos. En particular, hemos probado la existencia de un factor de correlación exacto y hemos derivado una expresión explícita en términos de éste para la energía de correlación en átomos de dos electrones.