

## TEMAS ESPECIALES

1. Espectro Raman. Experimento, transiciones, aplicaciones. Bibliografía: Molecular Quantum Mechanics, P.W. Atkins y R. S. Friedman.
2. Espectro IR. Experimento, transiciones, aplicaciones. Bibliografía: Molecular Quantum Mechanics, P.W. Atkins y R. S. Friedman.
3. Transición dipolar eléctrica. Transiciones permitidas y prohibidas. Principio de Franck-Condon. Bibliografía: Molecular Quantum Mechanics, P.W. Atkins y R. S. Friedman.
4. Polarizabilidades. Efecto Stark Bibliografía: Molecular Quantum Mechanics, P.W. Atkins y R. S. Friedman.
5. Efecto Jahn-Teller. Modos rotacionales Bibliografía: Landau.
6. Fosforescencia y fluorescencia. Bibliografía: Molecular Quantum Mechanics, P.W. Atkins y R. S. Friedman.
7. Transiciones Magnéticas. Estructura fina y acoplamiento spin-órbita.
8. RMN, NQR, ESR. Bibliografía: Molecular Quantum Mechanics, P.W. Atkins y R. S. Friedman.
9. Orbitales naturales. Bibliografía: Methods of Molecular Quantum Mechanics. R. McWeeny and B. T. Sutcliffe. Academic Press, New York (1992); P.O. Löwdin, Phys. Rev. 97 ,1474 (1955); G. Parr y W. Yang, Density Functional Theory of Atoms and Molecules.
10. Teoría del funcional de la densidad. Bibliografía: G. Parr y W. Yang, Density Functional Theory of Atoms and Molecules.
11. Cromóforos ¿Qué son? Bibliografía: Molecular Quantum Mechanics, P.W. Atkins y R. S. Friedman.
12. Consistencia en tamaño: 1) Estudie en qué consiste el problema de la consistencia en tamaño (Szabo Cap. 4) 2) Haga los ejercicios: 4.12, 4.15 del Szabo. 3) Analice el concepto de "consistencia en tamaño" de los métodos HF, MP2 y CI, y CID usando como ejemplo  $(H_2)_N$  de base mínima, cuidando que la distancia entre dos moléculas  $H_2$  sea lo bastante grande como para que no interactúen entre sí. 4) Vea para cuáles métodos la energía escala linealmente con N y para cuáles no.
13. Metodo Møller-Plesset de orden N: Estudiar su convergencia. Bibliografía: Capítulo 14.5 del Molecular electronic-structure theory. T. Helgaker, P. Jøsen y J. Olsen, Wiley and Sons, 2000
14. Modelo Spin-Flip. Bibliografía: Basarse en el artículo: Anna I. Krylov, Chemical Physics Letters 338(2001) 375-384. "Size-consistent wave functions for bond-breaking: the equation-of-motion spin-flip model"



### **Bibliografía Adicional**

Wartewig, Spectra Of Atoms And Molecules Peter Bernat

Físico-Química, P. W. Atkins.

Molecular Physics and Elements of Quantum Chemistry, Haken Wolf.