

Fechas de FINAL 2015-

Lunes 13 de abril 14 hs

Lunes 11 de mayo 14 hs

Lunes 15 de junio 14 hs

Deben comunicar (ferraro@df.uba.ar) TEMA y FECHA elegida para dar la exposición, que no superará los 20 minutos.

Quienes no puedan rendir en estos horarios se comunican para generar una fecha adicional

TEMAS ESPECIALES para FINAL

Transiciones electrónicas y estructura vibracional.

- 1- Espectro Raman. Experimento, transiciones, aplicaciones.
- 2- Espectro IR. Experimento, transiciones, aplicaciones.
- 3- Transición dipolar eléctrica. Transiciones permitidas y prohibidas. Principio de Franck-Condon.
- 4- Polarizabilidades. Efecto Stark
- 5- Efecto Jahn Teller. Modos rotacionales
- 6- Fosforescencia y fluorescencia.
- 7- Cromoforos ¿Qué son? Bibliografía: Molecular Quantum Mechanics, P.W. Atkins y R. S. Friedman.
- 8- Transiciones Magnéticas. Estructura fina y acoplamiento spin-órbita.
- 9- RMN, NQR, ESR
- 10- Corrimiento de Lamb.
- 11- Orbitales naturales- Bibliografía Methods of Molecular Quantum Mechanics. Mc Weeny and Stutcliffe. ; P. O. Löwdin, Phys. Rev 97, 1474 (1995); G. Parr and W. Yang, Density Functional Theory of Atoms and Molecules.
- 12- Consistencia de tamaño: Szabo, Cap. 4, con ejs 4.12 y 4.15 incluidos. Analizar el concepto de consistencia de tamaño en HF, MP2 y CI para $(H_2)_n$. En que casos la energía escala con "n" (numero de moléculas no interactuantes)
- 13- Método de Möller Plesset: estudiar su convergencia con N (número de electrones) Bibliografía: Cap. 4.5 de Molecular Electronic Structure Theory. T. Helgaker, P. Josen, and J. Olsen, Willey (2000)
- 14- Densidades de transición entre estados CI.
- 15- Teoría del funcional de la densidad
- 16- Colisiones atómicas.
- 17- Espectro H_2 completo incluyendo DIRAC

- 18- High-order expansion Jahn Teller potential-energy surfaces in tetrahedral molecules. Daniel Opalka and Wolfgang Domcke J. Chem. Phys. 132, 154108 (2010)
- 19- Heavy Rydberg states: The H+H- system. Adam Kirrander. J. Chem. Phys. 133, 121103 (2010)
- 20- The ionization and dissociation energies of HD. Daniel Sprecher, Jinjun Liu, Christian Jungen, Wim Ubachs, . Chem. Phys. 133, 111102 (2010)

Bibliografía

Ir And Raman Spectroscopy –

Wartewig, *Spectra Of Atoms And Molecules* Peter Bernat

Físico-Química, P. W. Atkins.

Molecular Quantum Mechanics, P. W. Atkins.

Molecular Physics and Elements of Quantum Chemistry, Haken Wolf.
Haken Wolf

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*.

TEMAS COMPUTACIONALES

-OZONO: emplear métodos correlacionados (diferentes DFT, MP2, CISD(T)) y comparar con HF.

-Consistencia de tamaño en H2 :*Hartree-Fock* , métodos correlacionados (MP2, CISD(T), CID)

-estados RCIS , frecuencias, densidad Ej. SH Cl

-estados UCIS, frecuencias, densidad. Ej. SH Cl

- CISingles; Test of Closed Shell Density output, Open Shell Density output