

## TEMAS ESPECIALES

### 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- Transiciones Magnéticas. Estructura fina y acoplamiento spin-órbita.
- 8- RMN, NQR, ESR
- 9- Corrimiento de Lamb.
- 10- Orbitales naturales
- 11- Densidades de transición entre estados CI.
- 12- Teoría del funcional de la densidad
- 13- Colisiones atómicas.
- 14- Efectos relativistas.

### 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.
- 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*.
- Relativistic effects in chemistry: More common than you thought, Pekka Pyykkö; The physics behind chemistry, and the Periodic Table, Pekka Pyykkö

## TEMAS COMPUTACIONALES

- OZONO: emplear métodos correlacionados (diferentes DFT, MP2, CISD(T) ) y comparar con HF.
- Consistencia de tamaño en H<sub>2</sub> :*Hartree-Fock* , métodos correlacionados (diferentes DFT, MP2, CISD(T) )
- 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