

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.

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 (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