

Cronograma tentativo de las teóricas:

30/8 - Hamiltoniano coulombiano Molecular. Aproximación de Born Oppenheimer. Sistemas de partículas idénticas.

3/9 - Simetría de intercambio. Correlación de intercambio, relación con el espín total. Ruptura de degeneración para partículas interactuantes. Integrales de Coulomb y de intercambio. Agujero de Fermi.

7/9 - Átomo de un electrón. Simetrías. Estructura fina. Teorema del virial. Átomo de dos electrones (He). Principio variacional y estado fundamental del He. Elementos de matriz de operadores de uno y dos cuerpos para estados de partícula independiente.

14/9 - **semana de la AFA**

24/9 - (mitad teórica - mitad práctica) Átomos multielectrónicos. Simetrías exactas y "términos espectrales". Aproximación de campo medio: configuración electrónica de átomos. Reglas de Hund. Potencial de ionización y afinidad electrónica.

28/9 - Propiedades atómicas según el llenado de niveles en átomos multielectrónicos. Tabla periódica. Regiones de la tabla periódica. Concepto de valencia atómica.

5/10 - Hamiltoniano electrónico. Base mínima. Notación. Aproximación de Hartree-Fock.

15/10 - (mitad teórica - mitad práctica) Hartree-Fock. Solución autoconsistente. Energías orbitales. Energía del estado de Hartree-Fock. Teorema de Koopmans. El problema de correlación electrónica. Teorema de Brillouin.

19/10 - Hartree-Fock y simetrías: RHF, ROHF, UHF. Orbitales moleculares. Ecuaciones de Roothaan. Teoría de perturbaciones de muchos cuerpos. Möller-Plesset. Molécula diatómica. El ion H_2^+ . Molécula diatómica: simetrías exactas, clasificación de estados por simetría. La serie X_2 : orbitales moleculares enlazantes, antienlazantes, pares no ligantes y capas internas.

26/10 - Molécula diatómica: simetrías exactas, clasificación de estados por simetría. La serie X²: orbitales moleculares enlazantes, antienlazantes, pares no ligantes y capas internas.

2/11 - Análisis del carácter del punto estacionario de Hartree-Fock. Propiedades respuesta de primer orden en la aproximación MECI y Hartree-Fock acoplado.

9/11 - Repaso

12/11 - Parcial

16/11 - Estados del campo de radiación. Interacción radiación-materia. Regla de oro de Fermi. Emisión espontánea. Aproximación dipolar eléctrica, dipolar magnética y cuadrupolar.

23/11 - Hamiltoniano para los estados nucleares en moléculas. Estados rotacionales y espectroscopía rotacional de moléculas diatómicas. Reglas de selección, espectros. Moléculas tipo trompo simétrico.

30/11 - Estados vibracionales y rotacionales de moléculas diatómicas. Reglas de selección.

7/12 - Modos vibracionales de moléculas poliatómicas simétricas. Grupos de simetría y representaciones. Clasificación por simetría de modos normales. Reglas de selección.

14/12 - Repaso. Tema especial.