

Cronograma tentativo:

L. 15/8 Hamiltoniano coulombiano Molecular. Aproximación de Born Oppenheimer. Sistemas de partículas idénticas.

J. 18/8 Sistema de electrones interactuantes. El espacio de Hilbert de N electrones. Estados de partícula independiente: determinantes de Slater. Operadores de uno y dos cuerpos. Simetría de intercambio.

L. 22/8: FERIADO

J. 25/8: Práctica: Serie 1. Comienzo.

L. 29/8: 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.

J. 1/9: Práctica: Serie 1

L. 5/9: Átomo de un electrón. Simetrías. Estructura fina. Teorema del virial. Átomos multielectrónicos. Simetrías exactas y "términos espectrales". Aproximación de campo medio: configuración electrónica de átomos.

J. 8/9: Átomo de dos electrones (He). Principio variacional y estado fundamental del He. Reglas de Hund. Potencial de ionización y afinidad electrónica.

L. 12/9: Práctica: Serie 2.

J. 15/9: Laboratorio de computación.

L. 19/9: AFA

J. 22/9: AFA

L. 26/9: Propiedades atómicas según el llenado de niveles en átomos multielectrónicos. Tabla periódica. Regiones de la tabla periódica. Concepto de valencia atómica.

J. 29/9: Práctica: Serie 2: reglas de Hund.

L. 3/10: Hamiltoniano electrónico. Base mínima. Hartree-Fock. Solución autoconsistente. Energías orbitales. Energía del estado de Hartree-Fock. Teorema de Koopmans. El problema de correlación electrónica. Teorema de Brillouin.

J. 6/10: 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^+ .

L. 10/10: FERIADO

J. 13/10: Práctica: Serie 3.

L. 17/10: Molécula diatómica: simetrías exactas, clasificación de estados por simetría. La serie X_2 : orbitales moleculares enlazantes, antienlazantes, pares no ligantes y capas internas.

J. 20/10: Práctica: Serie 3. Laboratorio de Computación.

L. 24/10: Análisis del carácter del punto estacionario de Hartree-Fock. Propiedades respuesta de primer orden en la aproximación MECI y Hartree-Fock acoplado.

J. 27/10: Serie 3.

L. 31/10: Serie 3.

J. 3/11: Consultas.

L. 7/11: Parcial.

J. 10/11: Estados del campo de radiación. Interacción radiación-materia. Regla de oro de Fermi. Emisión espontánea. Aproximación dipolar eléctrica, dipolar magnética y cuadrupolar.

L. 14/11: Hamiltoniano para los estados nucleares en moléculas. Estados rotacionales y espectroscopía rotacional de moléculas diatómicas. Reglas de selección, espectros. Estados vibracionales y rotacionales de moléculas diatómicas. Reglas de selección.

J. 17/11: Práctica: Reparto de temas especiales.

L. 21/11: Tema especial teórico.

J. 24/11: Práctica: Serie 4 – consultas temas especiales

L. 28/11 FERIADO

J. 1/12 Exposición temas especiales.

L. 5-12: Recuperatorio.