

Cronograma tentativo:

L. 30/1 Teórica: Hamiltoniano coulombiano Molecular. Aproximación de Born Oppenheimer. Sistemas de partículas idénticas.

M 01/2 Teórica: 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.

Práctica: Serie 1.

V 03/2 Teórica: 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.

Práctica: Serie 1

--

L. 06/2 Teórica: 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.

Práctica: Serie 1

M 08/2 Teórica: Átomo de dos electrones (He). Principio variacional y estado fundamental del He. Reglas de Hund. Potencial de ionización y afinidad electrónica.

Práctica: fin Serie 1 comienzo serie 2

V 10/2 Teórica: Propiedades atómicas según el llenado de niveles en átomos multielectrónicos. Tabla periódica. Regiones de la tabla periódica. Concepto de valencia atómica.

Práctica: serie 2

--

L. 13/2 Teórica: Hamiltoniano electrónico. Base mínima. Hartree-Fock. Solución autoconsistente. Energías orbitales. Energía del estado de Hartree-Fock.

Práctica: serie 2

M 15/2 Teórica: Teorema de Koopmans. El problema de correlación electrónica. Teorema de Brillouin.

Práctica: serie 3

V 17/2 Teórica: 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^+ .

Práctica: serie 3

--

L. 20/2 FERIADO (CARNAVAL)

M 22/2 Teórica: Molécula diatómica: simetrías exactas, clasificación de estados por simetría.

Práctica: serie 3

V 24/2 Teórica: La serie X_2 : orbitales moleculares enlazantes, antienlazantes, pares no ligantes y capas internas.

Práctica: serie 3

--

L. 27/2 FERIADO (EXTRAORDINARIO: BICENTENARIO DE LA CREACIÓN DE LA BANDERA)

M 29/2 Teórica: Análisis del carácter del punto estacionario de Hartree-Fock.

Práctica: serie 3 CI

V 02/3 Teórica: Propiedades respuesta de primer orden en la aproximación MECI y Hartree-Fock acoplado.

Práctica: serie 3

--

L. 05/3 Consultas

M 07/3 Parcial

V 09/3 Laboratorio de computación – Reparto de temas para el Trabajo Especial Obligatorio

L. 12/3 Teórica: Estados del campo de radiación. Interacción radiación- materia. Regla de oro de Fermi. Emisión espontánea. Aproximación dipolar eléctrica, dipolar magnética y cuadrupolar.

--

M. 14/3 Teórica: 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.

Práctica: Consultas para el recuperatorio

V. 16/3 Exposición de Temas Especiales (Obligatorio)

L 19/3 Recuperatorio