

ESTRUCTURA DE LA MATERIA 3

2do. Cuatrimestre 2015

Plan de Clases

- **Clase 1:** (Agosto 10) Teórica: El Problema atómico: introducción y conceptos. Práctica: Serie 0
- **Clase 2:** (Agosto 13) Teórica: El Problema atómico. Práctica: Serie 1
- **Clase 3:** (Agosto 20) Teórica: El Problema atómico. Práctica: Serie 1
- **Clase 4:** (Agosto 24) Teórica: Función de estado molecular: desacoplamiento y aproximación. Funciones de estado de muchos electrones. Práctica: Serie 2
- **Clase 5:** (Agosto 27) Teórica: Funciones de estado de muchos electrones (continuación). Práctica: Serie 2
- **Clase 6:** (Agosto 31) Teórica: H_2 base mínima. Configuraciones Spin Adaptadas. Práctica: Serie 2.
- **Clase 7:** (Septiembre 3) Teórica: Cálculo de elementos de matriz. Práctica: Serie 2.
- **Clase 8:** (Septiembre 7) Teórica: Intecc. Coulomb e intercambio. Práctica: Serie 2.
- **Clase 9:** (Septiembre 10) Teórica: Aproximación de Hartree-Fock, minimización de energía. Práctica: Serie 3.
- **Clase 10:** (Septiembre 14): Teórica: Ec. Canónicas de Hartree-Fock. Consecuencias y propiedades de la aprox. de Hartree-Fock. Práctica: Serie 3.
- **Clase 11:** (Septiembre 17) Teórica: Ec. de Roothaan: expansión en bases atómicas. Práctica: Serie 3.

- **Clase 12:** (Septiembre 24) Teórica: Correlación electrónica: Interacción de configuraciones (CI). Práctica: Serie 4.
- **Clase 13:** (Septiembre 28) Teórica: CI: H_2 base mínima. Práctica: Serie 4.
- **Clase 14:** (Octubre 1) Teórica: CI: Truncamiento. Consistencia en tamaño. Práctica: Serie 4.
- **Clase 15:** (Octubre 5): Teórica: CI: Truncamiento. Consistencia en tamaño (finalización). Práctica: Serie 4.
- **Clase 16:** (Octubre 8) : Teórica: Segunda cuantificación. Práctica: Serie 5.
- **Clase 17:** (Octubre 15): Teórica: Teoría de la Funcional de la Densidad. Consecuencias y propiedades fundamentales. Práctica: Serie DFT (aún no está en la página).
- **Clase 18:** (Octubre 19): Teórica: Teoría de la Funcional de la Densidad (finalización). Práctica: Serie 5.
- **Clase 19:** (Octubre 22): Prácticas computacionales. Explicación de modelos computacionales y ejercicio práctico: RHF + CI + Propiedades. (1ra. parte)
- **Clase 20:** (Octubre 26): Prácticas computacionales. Explicación de modelos computacionales y ejercicio práctico: RHF + Propiedades. (2da. parte)
- **Clase 21:** (Octubre 29): Prácticas computacionales. Explicación de modelos computacionales y ejercicio práctico: RHF + Propiedades. (3ra. parte - finalización)
- **Clase 22:** (Noviembre 2): Teórica: El Problema Nuclear y espectro rotacional. Práctica: Serie 6
- **Clase 23:** (Noviembre 5): Teórica: Espectroscopia vibracional. Problemas. Práctica: Exposición de la práctica computacional (15min por grupo)

- **Clase 24:** (Noviembre 9): Teórica: Transiciones espectrocópicas electrónicas. Problemas. Práctica: Exposición de la práctica computacional (15min por grupo)
- **Clase 25:** (Noviembre 12): Teórica: Transiciones espectrocópicas electrónicas. Problemas. Práctica: Exposición de la práctica computacional (15min por grupo)
- **Clase 26:** (Noviembre 16): Repaso y consultas
- **Clase 27:** (Noviembre 19): Prefinal
- **Clase 28:** (Noviembre 26): Entrega de exámenes, revisión y firma de libretas. Consultas para recuperatorio.
- **Clase 29:** (Noviembre 30): Recuperación prefinal.
- **Clase 30:** (Diciembre 3): Entrega de exámenes, revisión y firma de libretas. Está fecha es a confirmar.