ESTRUCTURA DE LA MATERIA 3

2do. Cuatrimestre 2016

Plan de Clases

- **Clase 1**: (Agosto 8) Teórica: El Problema atómico: introducción y conceptos.
- **Clase 2**: (Agosto 11) Serie 0
- **Clase 3**: (Agosto 18) Teórica: El Problema atómico (final)
- **Clase 4**: (Agosto 22) Teórica: a) El Problema atómico: aplicaciones; b) Función de estado molecular: desacoplamiento y aproximación. Funciones de estado de muchos electrones.
- **Clase 5**: (Agosto 25) Serie 1
- **Clase 6**: (Agosto 29) Teórica: Funciones de estado de muchos electrones (continuación); H_2 base mínima.
- **Clase 7**: (Septiembre 1) Final Serie 1 - Serie 2
- **Clase 8**: (Septiembre 5) Teórica: Elementos de matriz de operadores de muchas partículas.
- **Clase 9**: (Septiembre 8) Serie 2
- **Clase 10**: (Septiembre 12) Teórica: a) Interacciones de Coulomb y de intercambio; Aproximación de Hartree-Fock, miminización de la energía.
- **Clase 11**: (Septiembre 15) Serie 3
- **Clase 12**: (Septiembre 19) Teórica: a) Ec. Canónicas de Hartree-Fock. Consecuencias y propiedades de la aprox. de Hartree-Fock; b) Ecuaciones de Roothaan: expansión en bases atómicas.

- **Clase 13**: (Septiembre 22) Serie 4
- **Clase 14**: (Septiembre 26) Teórica: a) Correlación electrónica: Interacción de configuraciones (CI); b) Interacción de configuraciones de H_2 en base mínima.
- **Clase 15**: (Septiembre 29) Serie 4
- **Clase 16**: (Octubre 3) Teórica: CI: Truncamiento. Consistencia en tamaño.
- **Clase 17**: (Octubre 6) Serie 5
- **Clase 18**: (Octubre 13) Serie 5
- **Clase 19**: (Octubre 17) Teórica: Segunda cuantificación. Propiedades. Valores medios.
- **Clase 20**: (Octubre 20) Serie 6
- **Clase 21**: (Octubre 24) Teórica: Teoría de la Funcional de la Densidad. Consecuencias y propiedades fundamentales.
- **Clase 22**: (Octubre 27) Serie 7
- **Clase 23**: (Octubre 31) Prácticas computacionales (Clase 1): Explicación de modelos computacionales y ejercicio práctico: RHF + CI + Propiedades. (1ra. parte). La 2da. parte es en horario del turno de prácticas.
- **Clase 24**: (Noviembre 3) Prácticas computacionales (Clase 2)
- **Clase 25**: (Noviembre 7) Prácticas computacionales (Clase 3). Finalización.
- **Clase 13**: (Noviembre 10) Serie 7
- **Clase 27**: (Noviembre 14) Teórica-Práctica: El Problema Nuclear. Espectroscopía rotacional y vibracional. Serie 8
- **Clase 28**: (Noviembre 17)) Repaso y consultas

- **Clase 29**: (Noviembre 21) Teórica-Práctica: Transiciones espectrocópicas electrónicas. Serie 8. Final clases teóricas.
- **Clase 30**: (Noviembre 24) Parcial