

ESTRUCTURA DE LA MATERIA 3

2do. Cuatrimestre 2018

Plan de Clases

- **Clase 1:** (Lunes Agosto 13) Teórica: El Problema atómico: introducción y conceptos.
- **Clase 2:** (Jueves Agosto 16) Práctica: Serie 0
- Agosto 20: FERIADO
- **Clase 3:** (Jueves Agosto 23) Práctica: Serie 1
- **Clase 4:** (Lunes Agosto 27) Teórica: Función de estado molecular: desacoplamiento y aproximación. Funciones de estado de muchos electrones.
- **Clase 5:** (Jueves Agosto 30) Teórica: Funciones de estado de muchos electrones (continuación).
- **Clase 6:** (Lunes Septiembre 3) Teórica: H_2 base mínima. Configuraciones Spin Adaptadas.
- **Clase 7:** (Jueves Septiembre 6) Práctica: Serie 2.
- **Clase 8:** (Lunes Septiembre 10) Teórica: Cálculo de elementos de matriz. Intecc. Coulomb e intercambio.
- **Clase 9:** (Jueves Septiembre 13): Práctica: Serie 2
- **Clase 10:** (Lunes Septiembre 17): Teórica: Aproximación de Hartree-Fock, minimización de energía. Ec. Canónicas de Hartree-Fock. Consecuencias y propiedades de la aprox. de Hartree-Fock.
- **Clase 11:** (Jueves Septiembre 20) Práctica: Serie 3.
- **Clase 12:** (Lunes Septiembre 24) Teórica: Ec. de Roothann: expansión en bases atómicas.
- **Clase 13:** (Jueves Septiembre 27) Práctica: Serie 3.

- **Clase 14:** (Lunes Octubre 1) Teórica: Correlación electrónica: Interacción de configuraciones (CI).
- **Clase 15:** (Jueves Octubre 4): Práctica: Serie 4.
- **Clase 16:** (Lunes Octubre 8): Teórica: CI: truncamiento. Consistencia en tamaño. Modelo H_2 base mínima.
- **Clase 17:** (Jueves Octubre 11): Práctica: Serie 4.
- Lunes Octubre 15: FERIADO
- **Clase 18:** (Jueves Octubre 18): Práctica: Serie 4. Comienzo Serie 5
- **Clase 19:** (Lunes Octubre 22): Teórica: Segunda cuantificación. Propiedades. Valores medios. Fluctuaciones.
- **Clase 20:** (Jueves Octubre 25): Serie 5
- **Clase 21:** (Lunes Octubre 29): Teórica: Análisis y teoría de las distribuciones electrónicas: RDMs y densidades.
- **Clase 22:** (Jueves Noviembre 1): Práctica: Serie 5. Elección de textos, para su estudio y discusión (defensa) como parte de la aprobación de los Trabajos Prácticos.
- **Clase 23:** (Lunes Noviembre 5): Teórica: Teoría de la Funcional de la Densidad. Consecuencias y propiedades fundamentales. Serie 7
- **Clase 24:** (Jueves Noviembre 8): Serie 6
- **Clase 25:** (Lunes Noviembre 12): Teórica: El Problema Nuclear y espectro rotacional.
- **Clase 26:** (Jueves Noviembre 15): Teórica: Espectroscopia vibracional y electrónica.
- Lunes Noviembre 19: FERIADO
- **Clase 27:** (Jueves Noviembre 22): Repaso y consultas
- **Clase 28:** (Lunes Noviembre 26): Prefinal
- **Clase 29:** (Jueves Noviembre 29): Exposición oral de temas elegidos para discusión. Tiempo: 15min.
- Entrega de exámenes, revisión y firma de libretas. Consultas para recuperatorio: a confirmar.
- Recuperatorio: Jueves 6 de Diciembre