

ESTRUCTURA DE LA MATERIA 3

2do. Cuatrimestre 2019

Plan de Clases

- **Clase 1:** (Lunes Agosto 12) Teórica: El Problema atómico: introducción y conceptos.
- **Clase 2:** (Jueves Agosto 15) Práctica: Serie 0
- Agosto 19: FERIADO
- **Clase 3:** (Jueves Agosto 22) Práctica: Serie 1
- **Clase 4:** (Lunes Agosto 26) Teórica: Función de estado molecular: desacoplamiento y aproximación. Funciones de estado de muchos electrones.
- **Clase 5:** (Jueves Agosto 29) Teórica: Funciones de estado de muchos electrones (continuación).
- **Clase 6:** (Lunes Septiembre 2) Teórica: H_2 base mínima. Configuraciones Spin Adaptadas.
- **Clase 7:** (Jueves Septiembre 5) Práctica: Serie 2.
- **Clase 8:** (Lunes Septiembre 9) Teórica: Cálculo de elementos de matriz. Intecc. Coulomb e intercambio.
- **Clase 9:** (Jueves Septiembre 12): Práctica: Serie 2
- **Clase 10:** (Lunes Septiembre 16): 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 19) Práctica: Serie 3.
- **Clase 12:** (Lunes Septiembre 23) Teórica: Ec. de Roothann: expansión en bases atómicas.
- **Clase 13:** (Jueves Septiembre 26) Práctica: Serie 3.

- **Clase 14:** (Lunes Septiembre 30) Teórica: Correlación electrónica: Interacción de configuraciones (CI).
- **Clase 15:** (Jueves Octubre 3): Práctica: Serie 4.
- **Clase 16:** (Lunes Octubre 7): Teórica: CI: truncamiento. Consistencia en tamao. Modelo H_2 base mínima.
- **Clase 17:** (Jueves Octubre 10): Práctica: Serie 4.
- Lunes Octubre 14: FERIADO
- **Clase 18:** (Jueves Octubre 17): Práctica: Serie 4. Comienzo Serie 5
- **Clase 19:** (Lunes Octubre 21): Teórica: Segunda cuantificación. Propiedades. Valores medios. Fluctuaciones. Serie 6
- **Clase 20:** (Jueves Octubre 24): Serie 5
- **Clase 21:** (Lunes Octubre 28): Teórica: Análisis y teoría de las distribuciones electrónicas: RDMS y densidades.
- **Clase 22:** (Jueves Octubre 31): Práctica: Serie 5.
- **Clase 23:** (Lunes Noviembre 4): Teórica: Teoría de la Funcional de la Densidad. Consecuencias y propiedades fundamentales. Serie 7
- **Clase 24:** (Jueves Noviembre 7): Repaso y consultas. Eleccin de textos, para su estudio y discusin (defensa) como parte de la aprobacin de los Trabajos Prcticos.
- **Clase 25:** (Lunes Noviembre 11): Prefinal
- **Clase 26:** (Jueves Noviembre 14): Teórica: El Problema Nuclear y espectro rotacional.
- Lunes Noviembre 18: FERIADO
- **Clase 27:** (Jueves Noviembre 21): Teórica: Espectroscopia vibracional y electrónica.
- **Clase 28:** (Lunes Noviembre 25): Consultas sobre la exposición.
- **Clase 29:** (Jueves Noviembre 28): Exposición oral de temas elegidos para discusión. Tiempo: 15min.
- Entrega de exámenes, revisión y firma de libretas y consultas para recuperatorio: a confirmar.
- Recuperatorio: Fecha a confirmar