

ESTRUCTURA DE LA MATERIA 3

Curso Verano 2020

Plan de Clases

Parte I: Átomos

- **Clase 1:** (Enero 27) Teórica: El Problema atómico
- **Clase 2:** (Enero 29) Teórica: El Problema atómico (continuación). Función de estado molecular: desacoplamiento y aproximación.

Parte II: Funciones de estado electrónicas

- **Clase 3:** (Enero 31) Teórica: Funciones de estado de muchos electrones: soluciones y significados. Práctica: Serie 0
- **Clase 4:** (Febrero 3) Teórica: Ejemplo teórico quasi-analítico; H_2 base mínima. Estados puros: concepto y configuraciones. Funciones unideterminantes. Práctica: Serie 1
- **Clase 5:** (Febrero 5) Teórica: Configuraciones Spin Adaptadas. Ejemplos. Práctica: Serie 1 y comienzo Serie 2
- **Clase 6:** (Febrero 7) Teórica: Cálculo de elementos de matriz para funciones multi-electrónicas. Integrales de Coulomb e intercambio (definiciones) Práctica: Serie 2
- **Clase 7:** (Febrero 10) Teórica: Continuación elementos de matriz. Práctica: Serie 3
- **Clase 8:** (Febrero 12) Teórica: Aproximación de Hartree-Fock: estructura y significados. Práctica: Serie 3 y comienzo Serie 4

- **Clase 9:** (Febrero 14): Teórica: Aproximación de Hartree-Fock (continuación)
Práctica: Serie 4
- **Clase 10:** (Febrero 17) Teórica: Ecuaciones canónicas. Bases de expansión para cálculo. Práctica: Serie 4
- **Clase 11:** (Febrero 19) Teórica: Interacción de configuraciones (CI). Práctica: Serie 4
- **Clase 12:** (Febrero 21) Teórica: CI: : Modelo H_2 en base mínima. Consistencia en tamaño. Práctica: Serie 5
- **Febrero 24: FERIADO**
- **Clase 13:** (Febrero 26): Segunda cuantificación. Propiedades. Valores medios. Fluctuaciones. Práctica: Serie 5
- **Clase 14:** (Febrero 28): Teoría de la Funcional de la Densidad (Kohn, Hohenberg & Sham) (introducción) Práctica: Serie 6
- **Clase 15:** (Marzo 2): Teoría de la Funcional de la Densidad (continuación) Práctica: Serie 7
- **Clase 16:** (Marzo 4): Elección de temas para exposición. Consultas para parcial.
- **Clase 17:** (Marzo 6): Parcial

Parte III: Funciones de estado nucleares y espectroscopía

- **Clase 18:** (Marzo 9): Teórica: El Problema Nuclear (rotac. + vibrac.) y problemas.
- **Clase 19:** (Marzo 11): Teórica: Transiciones espectrocópticas. Entrega notas.
- **Clase 20:** (Marzo 13): Exposiciones TP especial.

- Recuperatorio en fecha a designar.