

CRONOGRAMA DE ESTRUCTURA DE LA MATERIA 3
Primer cuatrimestre de 2006

SEMANA	LUNES	MIÉRCOLES
20/3	Problema electrónico, aproximación de Born-Oppenheimer	Repaso de herramientas matemáticas y operadores cuánticos: matrices, autovalores y autovectores, Operadores de espín. Serie 0
27/3	Funciones de onda de muchos electrones	Sistemas atómicos, reglas de Hund. Serie 1
3/4	Aproximación de Hartree-Fock- Correlación	LABORATORIO de computación: ejercicios en sistemas atómicos
10/4	Aproximación de Hartree-Fock-Segunda cuantificación	Serie 2: Determinantes de Slater.
17/4	Aproximación de Hartree-Fock: Koopman, Brioullin	<u>1era. mitad:</u> TEÓRICA: ecuaciones de Roothan <u>2da. mitad:</u> PRÁCTICA: serie 3: Hartree-Fock
24/4	Práctica computacional en LABORATORIO	<u>1era. mitad:</u> TEÓRICA: ecuaciones de Roothaan <u>2da. mitad:</u> PRÁCTICA: completar serie 3: Hartree-Fock
1/5	FERIADO	Completar temas de 1er. Parcial. Práctica en LABORATORIO .
8/5	Capa abierta. Hartree-Fock no restringido	Consultas 1 ^{er} . Parcial
15/5	PRIMER PARCIAL	TODO TEÓRICA: análisis poblacional. Orbitales Naturales.
22/5	Matriz densidad- análisis poblacional	<u>1era. mitad:</u> TEÓRICA: Bases de funciones atómicas. Capa Abierta <u>2da. mitad:</u> PRÁCTICA: Hartree-Fock no restringido. Serie 4
29/5	Práctica en LABORATORIO	PRÁCTICA: serie 5 , análisis poblacional.
5/6	Interacción de Configuraciones	Práctica en LABORATORIO : integrar en los ejercicios todas las herramientas tratadas en el curso.
12/6	Interacción de Configuraciones	Completar serie 5 , análisis poblacional. Comenzar serie 6 , Interacción de Configuraciones
19/6	FERIADO	Serie 6 , Interacción de Configuraciones
26/6	Métodos post-HartreeFock	Práctica en LABORATORIO-CONSULTAS
3/7	CONSULTAS 2 ^{do} . Parcial	SEGUNDO PARCIAL

Exposición de trabajos de Laboratorio de computación: fecha a acordar con los alumnos, antes de la primera fecha de exámenes finales..