

1. Átomos Polieletrónicos

1. Átomos multieletrónicos
 - 1.1. Aproximación básica: Campo Central
 - 1.2. Solución al problema de Campo Central
 - 1.3. Potencial coulombiano
 - 1.4. Resultados para la aproximación de orden cero
 - : Función de onda
 - : Energía
 - : Número de ceros
 - : Caso particular: hidrogenoide
2. Efectos de Masa
 - 2.1. Isotópico de masa
 - 2.2. Relación entre sistemas de unidades
 - 2.3. Algunos Armónicos esféricos
3. Aproximación de Campo Central: Aspectos típicos de los niveles de energía
 1. Continuo de energía
 2. Región de validez para la aproximación de Ryberg
 3. Región Experimental
 4. Región de Validez para la aproximación hidrogenoide
4. Introducción al Spin
 - 4.1. Función de ondas de spin
5. Distribución de probabilidad electrónica
6. Propiedades y combinación de momentos angulares
7. Efectos relativistas. Ecuación de Dirac
 - 7.1. Aproximación de Campo Central: Corrección relativista
8. Resumen de teoría de perturbaciones
 - 8.1. Caso no degenerado
 - 8.2. Caso degenerado
9. Efectos relativistas en átomos hidrogenoides. Estructura fina.
 - Hm, 1^o Corrección relativista.
 - HD, término de Darwin.
 - HSO, término de interacción spin-órbita.
10. Espectro del hidrógeno
 - 10.1. Estructura fina del átomo de hidrógeno
 - 10.2. Transiciones dipolares
11. Cambio de base en funciones de onda

12. Ejemplos importantes de Campo Central: Átomos Alcalinos

12.1. Transiciones en átomos alcalinos

12.2. Espectro en átomos alcalinos

13. Espectros característicos de Rayos X

14. Función de onda antisimétricas. Configuraciones

14.1. Elementos de matriz entre determinantes de Slater

14.2. Observaciones generales

14.3. Notación del determinante de Slater

15. Técnicas de Cálculo en átomos polieletrónicos

15.1. Método de Thomas Fermi

15.2. Método de Hartree

15.3. Potencial Autoconsistente

15.4. Método Variacional

15.5. Método de Hartree-Fock

: Integral Hidrogenoide

: Términos directos o de Coulomb

: Término de Canje

2: Correcciones a la Aproximación de Campo Central

1. Interacción y términos electroestáticos

: Aproximación de Russell-Saunders.

2. Determinación de términos para una configuración

2.1. Algunos resultados generales

3. Correcciones a los niveles de energía. Regla de Hund

3.1. Correcciones ΔH_{elec} a la energía: Cálculo

3.2. Propiedades generales de las integrales de Slater

: Términos

: Conservación de la traza

: Corrección en la base de términos Elect.

4. Interacción Spin-Órbita

4.1. Aproximación de Russell-Saunders

4.2. Cálculo ΔH_{SO} en aproximación de Russell-Saunders

: Base de determinantes de Slater

: Base de términos electrostáticos

4.3. Propiedades de ΔE_{SO} en aproximación de Russell Saunders

5. Matriz de energía para las correcciones por ΔH_{elec} y ΔH_{SO}
 - 5.1. Otros tipos de acoplamiento
 - : Acoplamiento intermedio
 - : Acoplamiento LS
 - : Acoplamiento $j j$
 - : Acoplamiento $j k$
 - 5.2. Tratamiento en Acoplamiento Intermedio
6. Indicios de fallo en Aproximación de Russell-Saunders

3: Perturbación por campos externos

1. Orígenes de la corrección
 - 1.1. Análisis de la corrección
 - : Aproximación Zeeman
 - : Campos muy intensos
 - 1.2. Expresiones útiles
2. Cálculo de la perturbación por campo magnético externo
 - 2.1. Campo magnético débil
 - 2.2. Campo magnético intenso
 - 2.3. Campo magnético Muy intenso
3. Ejemplo cálculo válido para campos arbitrarios
 - : Aproximación de Zeeman
 - : Aproximación de Paschen-Back
4. Observación del Efecto Zeeman

4: Emisión y absorción de radiación por átomos

1. Interacción de átomos con la radiación
 - 1.1. Planteamiento Clásico
 - 1.2. Planteamiento Semiclásico
 - 1.3. Planteamiento completamente cuántico
2. Coeficientes de Einstein
 - a) Emisión espontánea.
 - b) Absorción.
 - c) Emisión estimulada.

- 2.1. Cálculo de los coeficientes de Einstein
- 2.2. Cálculo en átomos de Afi. Reglas de selección
- 3. Intensidad de líneas espectrales
 - : Líneas que parten del mismo nivel
 - : Líneas que parten de distintos niveles
 - : Transiciones entre dos multipletes

5: Estructura molecular

- 1. Aproximación de Born-Oppenheimer
- 2. Aplicación a moléculas diatómicas
 - 2.1. Movimiento Nuclear en Moléculas Diatómicas
 - 2.2. Anarmonicidad
 - 2.3. Distorsión Centrífuga
- 3. Estructura electrónica en moléculas diatómicas
 - 3.1. Consideraciones de simetría
 - : Simetría de revolución eje internuclear (por convenio, el eje Z).
 - : Simetría de reflexión σ_x respecto a cualquier plano que contenga al eje Z.
 - 3.2. Método de Rayleigh-Ritz
- 4. Molécula H_2^+
- 5. Moléculas diatómicas con varios electrones