

CURSO DE POSGRADO 2009: “ESTRUCTURA ATÓMICA I”

Versión más explícita

CURSO DE POSGRADO 2009: “ESTRUCTURA ATÓMICA I”

Unidad 0: Introducción

Material experimental. Átomos hidrogenoides y helioides. Teoría de Perturbaciones y Principio Variacional aplicado a los átomos helioides. Espectros de las capas externas. Tipos de sistematizaciones: defectos cuánticos, apantallamientos, penetraciones. Reglas de Slater para los apantallamientos. Espectros de rayos X característicos. Unidades para las energías. El perfil de las líneas: Lorentz, Doppler y Voigt. Convolución y deconvolución.

Referencias particulares:

Karplus-Porter: *Atoms and Molecules*.
Curtis: *Atomic Structure and Lifetimes*.
Agarwal

Unidad 1: Sistemática de los espectros de átomos complejos

Ecuación de Schrödinger. El modelo de campo central. Configuraciones, términos y niveles. Energía promedio de las configuraciones; desarrollo en potencias de Z^{-1} . Acoplamientos LS y jj. Propiedades de los momentos angulares. Símbolos $3n-j$. Estudio y análisis de espectros experimentales.

Referencias particulares:

Layzer (y cols.): trabajos varios
Di Rocco (y cols.): trabajos varios.
Cowan: caps. 4 y 5.

Unidad 2: Energía promedio de las configuraciones

Elementos de matriz de operadores simétricos. Energías de ligadura uni-electrónicas y total de los átomos. Energías de ionización y energías de ligadura uni-electrónicas. Aplicaciones del desarrollo en Z^{-1} . Ejemplos.

Referencias particulares:

Cowan: cap. 6
Di Rocco (y cols.): trabajos varios.

Unidad 3: Ecuaciones de onda, funciones de onda e integrales radiales.

Ecs. de Hartree-Fock. Otros modelos (Thomas-Fermi, etc.). Correcciones relativistas. Correcciones por correlación. Funciones de onda radiales e Integrales radiales. Variación con Z de las energías de ligadura, de las integrales radiales y de spin-órbita. Estimación semi-empírica de las integrales radiales.

Referencias particulares:

Cowan: caps. 7 y 8

Unidad 4: Funciones de onda acopladas antisimétricas

Acoplamiento de momentos angulares. Acoplamiento de funciones antisimétricas.
Acoplamiento de momentos angulares. Diversos tipos de acoplamiento: LS, jj y otros.
Coeficientes de paternidad fraccionaria. El número de senioridad. Elementos de matriz de operadores simétricos.

Referencias particulares:

Cowan: cap. 9

Unidad 5: Estructura de los niveles para configuraciones simples

Energías cinética y potencial electrón-núcleo. Configuraciones de uno y dos electrones fuera de capa cerrada: elementos de matriz coulombiano y spin-órbita. Tipos de acoplamiento: LS, jj y otros. Pureza de los autovectores.

Referencias particulares:

Cowan: cap. 10

Curtis

Unidad 6: Transiciones radiativas de tipo E1

Probabilidades de transición A_{ji} y cantidades relacionadas: line strength y oscillator strength. Reglas de selección. Cálculos de tipo teórico y semi-empírico de los A_{ji} . Violación de las reglas de selección. Mediciones experimentales de los A_{ji} . Aplicaciones a la Astrofísica.

Referencias particulares:

Cowan: cap. 14

Curtis: *Atomic Structure and Lifetimes*.

Referencias generales

Cowan, R. D.: *The Theory of Atomic Structure and Spectra*.

Fischer, Ch. y otros: *Computational Atomic Structure*.

Lindgren, I. y Morrison, J.: *Atomic Many-Body Theory*.

Rudzikas, Z.: *Theoretical Atomic Spectroscopy*.

Mizushima, M.: *Quantum Mechanics of Atomic Spectra and Atomic Structure*.

Agarwal, B. K.: *X-Ray Spectroscopy*.

así como artículos de revistas como Physical Review A, Journal of Physics B, Physica Scripta, etc.