

Análisis de la Estructura Atómica

CONTENIDOS MÍNIMOS:

Introducción. Átomos Monoelectrónicos y Plurieletrónicos. Estructura de Niveles de Energía. Transiciones Radiativas. Cálculos Numéricos. Análisis Espectral. Puntos Especiales.

PROGRAMA ANALÍTICO:

UNIDAD 1. INTRODUCCIÓN

Estudio de espectros característicos, técnicas experimentales utilizadas, unidades, secuencias características, términos, diagramas de Grotrian, análisis semiempírico de espectros.

UNIDAD 2. ÁTOMOS MONOELECTRÓNICOS Y PLURIELECTRÓNICOS

La ecuación de Schrodinger, soluciones a la ecuación radial, funciones de onda, niveles de energía, estructura fina, el modelo de campo central, interacción electrostática y spin-órbita. Distintos tipos de acoplamientos. Sistemática de los espectros con distintas configuraciones electrónicas, energías promedio de configuraciones.

UNIDAD 3. ESTRUCTURA DE NIVELES DE ENERGÍA

Elementos de matriz spin-órbita y coulombiano para configuraciones simples y complejas, electrones equivalentes y no equivalentes, integrales directas y de intercambio, acoplamientos intermedios, interacción de configuraciones, cálculo de niveles de energía para configuraciones sencillas.

UNIDAD 4. TRANSICIONES RADIATIVAS

Probabilidades de transición de Einstein, Radiación dipolar eléctrica, reglas de selección, intensidad de oscilador, radiación dipolar magnética y cuadrupolar eléctrica, transiciones prohibidas.

UNIDAD 5. CÁLCULOS NUMÉRICOS

Cálculo numérico de niveles de energía y espectros, cálculos tipo Hartree-Fock, diagonalización de las matrices de energía, cálculos *Ab Initio*, ajuste de los parámetros teóricos a los experimentales, uso de regularidades en los cálculos atómicos.

UNIDAD 6. ANÁLISIS ESPECTRAL

Determinación de diversos parámetros atómicos utilizando datos experimentales, uso de regularidades entre los espectros y cálculos atómicos.

UNIDAD 7. PUNTOS ESPECIALES

Átomos altamente ionizados, campos externos, estados continuos, ionización y recombinación.

BIBLIOGRAFIA:

The Theory of Atomic Structure and Spectra
R. D. Cowan (University of California Press. 1981).

Atomic Spectra and Radiative Transitions
I.I. Sobelman (Springer- Verlag. 1977).

Intruduction to the Spectroscopy of Atoms
P. H. Heckmann and E. Trabert (Nort - Holland. 1989).

Física Atómica Aplicada
H. O. Di Rocco (Publicación de la U. N. C. P. B. A. 1995).

Computational Atomic Structure. An MCHF Approach
C. Froese Fischer, T. Brage and P. Jonsson (I. P. P. - UK. 1997).

Theoretical Atomic Spectroscopy
Z. Rudzikas (Cambridge University Press. 1997).