

# Física Atómica, Molecular y Óptica

## Introducción a la estructura de átomos y métodos de prueba

1. Introducción: Estructura de átomos simples (uno y dos electrones)
2. Estructura de átomos multielectrónicos.
  - Métodos autoconsistentes, Hartree-Fock
  - Teoría de funcional densidad
3. Descripción de experimentos y teoría de colisiones atómicas
  - Secciones eficaces
  - Colisiones elásticas
  - Reacciones de Excitación y captura electrónica
  - Ionización
4. Interacción de átomos y moléculas con fotones
  - Descripción del campo E.M. Elección de la medida
  - Procesos de absorción y emisión de luz (excitación de átomos)
  - Fotoionización de átomos
  - Autoionización de átomos

## Resultados fenomenológicos - Espectroscopía de partículas

1. Aceleradores,
  - Fuentes de iones
  - Fuentes de electrones
  - Fuentes de positrones
2. Espectroscopía de electrones
  - Analizadores de electrones
  - Técnica de tiempo de vuelo
  - Detectores: tipos, principios de funcionamiento y modos de operación
3. COLTRIMS - MOTRIMS
  - Enfriamiento del blanco
  - Espectroscopía de iones residuales
  - Cinemática de tres cuerpos
  - Experimentos cinemáticamente completos
4. Resultados de Mediciones
  - Secciones eficaces totales de ionización y captura electrónica

- Características de los espectros en ionización y captura (DDCS)
- Información complementaria en espectroscopía de electrones y de iones
- Práctica de laboratorio 1: Ionización de átomos
- Aplicaciones a caracterización de materiales mediante colisiones
- Práctica de laboratorio 2: En acelerador TANDEM, técnica de caracterización

## Descripción teórica de resultados experimentales

1. Cálculo de secciones eficaces
  - Métodos perturbativos y expansión en series
  - Secciones eficaces de excitación, captura e ionización en colisiones energéticas
2. Teoría de fotoionización
  - Aproximación de campo fuerte
  - Ondas de Volkov y Coulomb-Volkov
3. Autoionización y excitación multielectrónica
4. Confinamiento de átomos
5. Condensación de Bose-Einstein

## Introducción a la estructura molecular

1. Separación de Born-Oppenheimer, superficies de potencial.
2. Teoría de orbitales moleculares
  - Combinación de orbitales atómicos
  - Estructura electrónica de moléculas diatómicas homonucleares y heteronucleares.
  - Ligaduras covalente e iónica
  - Combinaciones adaptadas a la simetría. Hibridización.
3. Aplicación de métodos autoconsistentes a moléculas
  - Ecuaciones de Roothaan y desarrollo en bases
4. Fotoionización de moléculas

## Rotaciones y vibraciones moleculares

1. Separación de los movimientos rotacionales y vibracionales
2. Niveles rotacionales
  - Rotores rígidos
  - Funciones de onda y energías
  - Inclusión de la distorsión centrífuga
3. Excitación de niveles rotacionales por radiación
  - Espectros de absorción. Reglas de selección
  - Procesos Raman. Reglas de selección
4. Vibraciones moleculares

- Aproximación armónica
  - Oscilación anarmónica
5. Excitación de niveles vibracionales y roto-vibracionales por radiación
- Espectros de absorción y reglas de selección vibracionales
  - Excitaciones roto-vibracionales
  - Transiciones Raman de moléculas diatómicas
  - Estadística nuclear
  - Moléculas poliatómicas

## Resultados fenomenológicos - Espectroscopía de fotones

1. Descripciones experimentales
- Fuentes de luz y detectores
  - Luz de Sincrotrón
  - Láseres
2. Absorción y fluorescencia atómica
3. Métodos de medición en moléculas
- Medición de la absorción
  - Medición por efecto Raman
  - Práctica de laboratorio 3: Medición en FTIR
4. Análisis de espectros

## Profesores

- Dr. R. O. Barrachina
- Dr. F. D. Colavecchia
- Dra. R. Della Picca
- Dr. J. Fiol
- Dr. D. Fregenal
- Dr. J. D. Fuhr
- Dr. G. Rozas
- Dr. S. D. Suárez