

# Estructura de la Materia 3

## Temas Especiales

1° cuatrimestre de 2014

### Pautas Generales

Para desarrollar el Trabajo Especial (Obligatorio) deberán constituirse en grupos de dos personas. Cada grupo elegirá uno de los temas listados a continuación, debiendo indicarnos el tema elegido (no pudiéndose repetir los mismos).

La exposición oral (con proyector) deberá tener una duración de 10 a 12 minutos. El informe escrito se entregará en fecha a confirmar.

Pautas para el informe del trabajo práctico computacional.

- Tipo de hoja: A4
- Tamaño de letra 12 o 14
- Número máximo de páginas del texto: 4, numeradas (sin contar las tablas y gráficos)
- Si lo desean, colocar las tablas y gráficos en hojas aparte al final del texto. (Usar las hojas que sean necesarias)
- Carátula. Con integrantes del grupo , y título del trabajo
- Entrega. Dos opciones:
  - Opción i (recomendada) - Mandar el archivo pdf por correo electrónico a las siguientes tres direcciones : jmelo@df.uba.ar, darodrig@tandar.cnea.gov.ar, azua@df.uba.ar.
  - Opción ii - Entregar tres copias del informe impreso en tiempo y forma.

## MODELO DE HÜCKEL

Monti, Tarkowski

- Comenzar resolviendo el ejercicio 21 de la práctica 3
- Estudiar ciclos aromáticos y antiaromáticos y las Reglas de Hückel

**Bibliografía:** Molecular Quantum Mechanics, P.W. Atkins y R. S. Friedman.

## CONSISTENCIA EN TAMAÑO

Cornes, Cataldi

- Estudie en qué consiste el problema de la consistencia en tamaño (Szabo Cap. 4)
- Haga los ejercicios : 4.12, 4.15 del Szabo.
- Analice el concepto de "consistencia en tamaño" de los métodos HF, MP2 y CI, y CID usando como ejemplo  $(H_2)_N$  de base mínima, cuidando que la distancia entre dos moléculas  $H_2$  sea lo bastante grande como para que no interactúen entre sí.
- Vea para cuáles métodos la energía escala linealmente con N y para cuáles no.

## FOSFORESCENCIA Y FLUORESCENCIA

Analice el Principio de Franck-Condon

**Bibliografía:** Molecular Quantum Mechanics, P.W. Atkins y R. S. Friedman.

## CROMOFOROS

¿Qué son?

**Bibliografía:** Molecular Quantum Mechanics, P.W. Atkins y R. S. Friedman.

## MÉTODO Møller-Plesset DE ORDEN N

Estudiar su convergencia

**Bibliografía:** Capítulo 14.5 del Molecular electronic-structure theory. T. Helgaker, P. Jøsen y J. Olsen, Wiley and Sons, 2000

## **EFEECTO RAMAN**

**Urquia, Gulich**

Teoría, experimento y aplicaciones

**Bibliografía:** Molecular Quantum Mechanics, P.W. Atkins y R. S. Friedman.

## **POLARIZABILIDAD MOLECULAR**

- Obtener la expresión del tensor de polarizabilidad electrónica molecular. Hallar su valor para H<sub>2</sub> de base mínima. Comparar con valores experimentales. ¿Puede hacer algo mejor?
- Explique el resultado en términos de limitaciones de la base usada. ¿Será cualitativamente cierto el resultado hallado? Repita el cálculo con una base grande y saque conclusiones. Puede hacerlo a nivel RPA (equivalente a CHF) y/o MP2.

**Bibliografía:** Molecular Quantum Mechanics, P.W. Atkins y R. S. Friedman.

## **TEOREMA DE JAHN TELLER**

**Bibliografía:** Landau.

## **DETERMINACION SIMULTANEA DE FUNCIONES DE ONDA NUCLEARES Y ELECTRONICAS SIN BORN-OPPENHEIMER**

Basarse en los artículo: Nakai Hiromi, Int. Journal of Quantum. Chem. vol 86, 511-517 (2002). Y: Tachikawa et.al. , Chem. Phys. Lett. vol 290, 437-442 (1998)

## **RELATIVIDAD EN ATOMOS Y MOLECULAS**

Estudiar como afectan los efectos relativistas al átomo de Hidrogeno, a primer orden. Para obtener las correcciones Spin-Orbita , Darwin y Massvelocity

**Bibliografía:** Consultar J. Melo.

## **PARAMETROS ESPECTRALES DE RMN**

Describir que es el apantallamiento magnetico nuclear. Teoría, experimento y aplicaciones

**Bibliografía:** Consultar. J. Melo

## **SIMETRIA EXTRA EN EL HIDROGENO**

**Pinto, Lanosa**

Como se genera la degeneracion en 'l' debido a una simetria extra en el H.  
**Bibliografía:** Pedir a M. Ruiz de Azua.