

## TEMAS DE FINAL

Este listado constituye una sugerencia.

La idea es que se comuniquen (ferraro@df.uba.ar) habiendo elegido 2 o 3 posibles temas para que se les asigne uno.

En caso de coincidencias es posible que se armen exámenes “temáticos”, en el sentido que 2 o 3 estudiantes contarán temas que sigan un determinado hilo temático.

Se propone una presentación tipo PPT, o PDF, de no más de 20 a 25 minutos. Se trata de contar y discutir conceptualmente, sin detalle de cuentas ni demostraciones, *y presentar a continuación su aplicación a algún artículo científico publicado recientemente* en revistas del área, por ejemplo:

Journal of CHEMICAL PHYSICS

Journal of CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION

Molecular Physics

International Journal of Quantum Chemistry

Physical Review A.

Lo ideal es hacer la búsqueda por SUBJECT en Google scholar

-Cualquiera sea la elección tienen que hacer un *update* del tema, buscando, por ejemplo, artículos más recientes en el tema, y/o del mismo autor.

**-REVISAR LOS DIFERENTES CAPITULOS con correlación y/o función respuesta de HELGAKER, JENSEN, SZABO**

- T. Helgaker, P. Jøsen, J. Olsen, Willey and sons, 2000.

- Jensen, Frank.

Introduction to computational chemistry / Frank Jensen. – 2nd ed. Willey (2007)

-Modern Quantum Chemistry. Introduction to advanced electronic structure theory'.

A. Szabo y N. S. Ostlund, Mc Millan Publishing Co. (1982)

Este listado constituye una sugerencia. La idea es que **elijan un tema** que incluya correlación (pueden ver el archivo [Clase de métodos post Hartree-Fock](#))

En la sección Materiales de la página de la materia), lo cuenten y discutan conceptualmente, sin detalle de cuentas ni demostraciones, y *presentar a continuación su aplicación a algún artículo científico publicado* en revistas del área, por ejemplo

-Es conveniente que consulten por correo electrónico si el artículo que han elegido es adecuado antes de comenzar a trabajarlo.

-También es posible **estudiar temas post\_HF que se refieren a 1) tratamiento relativista de propiedades moleculares.** (pueden comenzar por el capítulo 8 de Introduction\_to\_Computational\_Chemistry, Frank JENSEN, WILEY. y luego solicitar bibliografía; 2) – **HARTREE- FOCK dependiente del TIEMPO:** es el estudio de propiedades respuesta a campos externos intensos dependientes del tiempo (ejemplo: láser, campo electromagnético, etc), para los que no se puede aplicar la teoría de perturbaciones. Corresponde a la solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo

$$i\hbar \frac{\partial \psi(t)}{\partial t} = \hat{H}(t)\psi(t).$$

La función de onda dependiente del tiempo se desarrolla en el conjunto de autofunciones del Hamiltoniano  $\hat{H}_0 \varphi_i = \omega_i \varphi_i$  independiente del tiempo,  $H_0$ ,

$$\psi(t) = \sum_i C_i(t) \varphi_i.$$

Las ecuaciones a resolver constituyen un conjunto de ecuaciones acopladas para los coeficientes

$$i\hbar \frac{\partial C_i(t)}{\partial t} = \sum_j H_{ij}(t) C_j(t). \quad \text{con} \quad H_{ij}(t) = \langle \varphi_i | \hat{H} | \varphi_j \rangle.$$

Excepto para sistemas simples, como H2, resultan poco prácticas.

La solución es Hartree-Fock dependiente del tiempo consiste en un DETERMINANTE DE HARTREE FOCK para el que los orbitales moleculares dependen del tiempo

$$\psi(t) = \hat{A}[\phi_1(t)\phi_2(t)\cdots\phi_n(t)].$$

### **Artículo ejemplo:**

*A time-dependent Hartree–Fock approach for studying the electronic optical response of molecules in intense fields.* Phys Chem. Chem. Phys. , 2005, 7, 233–239.

### **A nivel DFT: TDDFT:**

Aparece una cantidad de artículos. Se puede **solicitar bibliografía** y buscar artículos.

### **Por ejemplo**

C. H. Patterson (2020): Excited states of molecular and crystalline acetylene: application of TDHF and BSE via density fitting methods, Molecular Physics, DOI:10.1080/00268976.2020.1792568

## **ORBITALES NATURALES**

- *Intermolecular interactions from a natural bond orbital, donor-acceptor viewpoint.* DOI: 10.1021/cr00088a005; Chemical Reviews, volume 88, issue 6
- Efficient Evaluation of Poly-Electron Populations in Natural Bond Orbital Analysis, September 2018, Chemical Physics Letters, 711, DOI: 10.1016/j.cplett.2018.09.013, Eric Glendening, Frank Weinhold.
- otros artículos de Frank Weinhold en la *bibliografía on line*. Pueden buscar con Google scholar.

### **Análisis Poblacional**

**Leer capítulo 9 de** Introduction\_to\_Computational\_Chemistry, Frank JENSEN, WILEY. Luego, buscar bibliografía actualizada y trabajar en alguno de los 2 temas siguientes:

**-Método AIM, Atoms in Molecules, BADER**

*Atoms in Molecules and Population Analysis;*

[120\\_2009\\_aim\\_popul\\_ch\\_15](#); *Chemical Reactivity Theory: A Density Functional View* 65432\_C015 Final Proof page 215  
16.1.2009

*Valence Bond Theory-* (buscar e libro de Jensen o Kunar, por ejemplo) Artículo interesante de aplicación:

[No\\_Pair\\_Bonding\\_in\\_the\\_High\\_Spin\\_3\\_State.pdf](#) (J. Am. Chem. Soc. 1999, 121, 3165-3174) [en link provisto](#) [en material de consulta](#)

- **También tienen numerosos temas, muy adecuados para presentar, en**  
*Pratim Kumar Chattaraj - Chemical reactivity theory\_ a density functional view-CRC Press\_Taylor & Francis (2009).*

Pueden consultar y solicitar algún capítulo.

-**Estudio de Confórmeros de muy cercanos en energía**

*Ejemplo:* B<sub>2</sub>H<sub>4</sub>. Ver subcarpeta [B2H4-conformeros](#) en material para finales.

-**Métodos Correlacionados**

En todos ellos analizar, convergencia, consistencia de tamaño, si son o no variacionales. Comparar resultados con HF y otros métodos

- Un tema interesante es la representación de ESTADOS EXCITADOS a diferentes niveles de correlación: HF, CI, CC, DFT, buscando bibliografía y generando un informe.

## 1- Método Møller Plesset.

- Assessment of Perturbative Explicitly Correlated Methods for Prototypes of Multiconfiguration Electronic Structure
  - Luke B. Roskop, Liguo Kong, Edward F. Valeev, Mark S. Gordon, and Theresa L. Windus
- *J. Chem. Theory Comput.*, **2014**, 10 (1), pp 90–101
- *J. Chem. Phys.* 112, 9736 (2000); <https://doi.org/10.1063/1.48161112>
- “Divergence in “Møller Plesset theory: A simple explanation based on a two-state model”
  - Surprising cases of divergent behavior in Møller Plesset perturbation theory. *The Journal of Chemical Physics* 105, 5082 (1996); <https://doi.org/10.1063/1.472352>.
  - Why does MP2 work? *The Journal of Chemical Physics*, 145, 184101 (2016); <https://doi.org/10.1063/1.4966689>
  - Extended Møller-Plesset perturbation theory for dynamical and static correlations. T. Tsuchimochi and T. Van Voorhis, *J. Chem. Phys.* **141**, 164117 (2014)

## 2- Método de Coupled Cluster

- Aproximaciones CC; CCSD, CCSD(T). Estudiar consistencia de tamaño, variacionalidad. Haciendo búsqueda bibliográfica y artículos publicados hasta llegar al estado actual.

**Bibliografía:** **Capítulo 13.** *Molecular electronic-structure theory.* T. Helgaker, P. Jøsen, J. Olsen, Wiley and sons, 2000.

Ej.

### **Coupled Cluster in Condensed Phase. Part I: Static Quantum Chemical Calculations of Hydrogen Fluoride Clusters**

Joachim Friedrich, Eva Perlt, Martin Roatsch, Christian Spickermann, and Barbara Kirchner *J. Chem. Theory Comput.*, **2011**, 7 (4), pp 843–851.

### **Convergence of coupled cluster perturbation theory**

The Journal of Chemical Physics 145, 224104 (2016);

<https://doi.org/10.1063/1.4971294>

3-

#### **a1) The UHF Dissociation, and the Spin Contamination Problem**

Ver **Cap. 4**. *Introduction\_to\_Computational\_Chemistry*, Frank JENSEN, WILEY

y trabajar bibliografía actualizada del tema con HF, CI, CC para hacer un informe.

#### **a2) SISTEMAS PROBLEMÁTICOS:**

-FOOF

-CO, su momento dipolar incluido

-frecuencias vibracionales de O<sub>3</sub>

- VER PARA INICIAR BÚSQUEDA DE ESTADO ACTUAL:

*Introduction\_to\_Computational\_Chemistry*, Frank JENSEN, WILEY

**Sección 11.7:**

11.7.1 The geometry of FOOF 371

11.7.2 The dipole moment of CO 372

11.7.3 The vibrational frequencies of O<sub>3</sub>

4- Dramatic changes in electronic structure revealed by fractionally charged nuclei

J. Chem. Phys. **140**, 044110 (2014); <https://doi.org/10.1063/1.4858461>

## TEORIA DEL FUNCIONAL DE LA DENSIDAD DFT

*A posteriori* corrections to systematic failures of standard density functionals: The dissociation of two-center three-electron systems

J. Chem. Phys. **115**, 11068 (2001); <https://doi.org/10.1063/1.1418439>

([buscar otros artículos del mismo tema](#): ej: The dissociation of two-center three-electron systems, y hacer un informe)

**VOLUMEN ESPECIAL:** en este volumen tienen numerosos artículos de aplicación, uso, ventajas y desventajas de DFT. La idea es actualizar con nueva bibliografía y **hacer un informe de uno de ellos.**

**JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION, VOL 5, (2009)**

### 1- Estado actual problemas no RESUELTOS en Teoría del funcional de la densidad

5.0 - a) **J. Chem. Theory Comput.** 2009, 5, 902–908

*Some Fundamental Issues in Ground-State Density Functional Theory: A Guide for the Perplexed*

John P. Perdew, Adrienn Ruzsinszky, Lucian A. Constantin, Jianwei Sun,† and Gabor I. Csonka

En el siguiente artículo (que está en carpeta de TEMAS, tienen un resumen breve de los temas a continuación, La idea es buscar bibliografía actualizada y hacer un informe del tema elegido.

b) **Chem Rev.** 2012 Jan 11;112(1):289-320. doi: 10.1021/cr200107z

*Challenges for Density Functional Theory* Aron J. Cohen, Paula Mori-Sánchez, and Weitao Yang

5.1 The Need to Improve the Description of Reaction Barriers and Dispersion/van der Waals Interactions.

VER: [http://www.q-chem.com/qchem-website/manual/qchem51\\_manual/sect0017.html](http://www.q-chem.com/qchem-website/manual/qchem51_manual/sect0017.html)

- Perspective: Advances and challenges in treating van der Waals dispersion forces in density functional theory

J. Chem. Phys. **137**, 120901 (2012); <https://doi.org/10.1063/1.4754130>

(ver avances recientes en este tema y hacer un informe)

5.2 To Understand the Significance of  $E[F]$  vs  $E[\{\phi_i, \epsilon_i\}]$ , OEP, and Beyond.

Sección 6.5.5. *Introduction to Computational Chemistry*, Frank JENSEN, Wiley

5.3 Delocalization Error and Static Correlation Error

5.4 The Energy of Two Protons Separated by Infinity with One and Two Electrons: **Strong Correlation**

5.5 Dispersion and van der Waals Forces.

a- **C6/R6** Corrections and Other Simple Corrections

b- Explicit van der Waals Functionals

5.6 JACOBBS' LADDER, J. Chem. Phys. 123, 066201 (2005)-

5.7 Buscar en: *Introduction to Computational Chemistry*, Frank JENSEN, WILEY.

Sección:

## **6.7 DFT Problems**

Elegir un PROBLEMA, actualizar con la bibliografía y hacer un informe.

- CISingles; Test of Closed Shell Density output, Open Shell. Density output



## OTROS TEMAS

se sugiere buscar bibliografía adicional para preparar el tema:

1- *On the physical interpretation of the nuclear molecular orbital energy*

Jorge Charry, Laura Pedraza-González, and Andrés Reyes

The Journal of Chemical Physics 146, 214103 (2017); doi: 10.1063/1.4984098

View online: <http://dx.doi.org/10.1063/1.4984098>

2- *Searching for DFT-based methods that include dispersion interactions to calculate the physisorption of H<sub>2</sub> on benzene and graphene*

J Chem Phys, 2017 Jun 7;146(21):214104.

doi: 10.1063/1.4984106.

I. Cabria, M. J. López, and J. A. Alonso

### b) **Size Consistency and Size Extensivity**

- Ver Cap. 4. Introduction\_to\_Computational\_Chemistry, Frank JENSEN, WILEY

Y trabajar bibliografía actualizada del tema. Tener en cuenta:

[https://cc-lecture.readthedocs.io/en/latest/size\\_extensivity.html](https://cc-lecture.readthedocs.io/en/latest/size_extensivity.html)

### c) **CI and CC for the hydrogen dimer**

. Tener en cuenta:

[https://cc-lecture.readthedocs.io/en/latest/size\\_extensivity.html](https://cc-lecture.readthedocs.io/en/latest/size_extensivity.html)