

Trabajos Especiales

Los ya elegidos:

CROMOFOROS (Pablo Alcain y Tatiana Alonso Amor)

* ¿Qué son?

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

ACTIVIDAD OPTICA (Iván Paganini y Daniel Guberman)

* Para entender la actividad óptica (poder rotatorio), use la aproximación semiclásica de la interacción radiación-materia, pero retenga hasta el orden dipolar magnético.

* Analice el momento dipolar eléctrico inducido por la perturbación, que puede escribirse, donde se ha separado explícitamente la contribución adicional. Determine el parámetro 'beta' mediante RSPT.

* Demuestre que si la molécula tiene un plano de simetría o un centro de inversión, entonces $\beta = 0$, y en cambio si hay dos enantiómeros, β_l y β_d , entonces $\beta_l = -\beta_d$.

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

TEMA PROPUESTO POR Marcelo Sandkovsky????

CONSISTENCIA EN TAMAÑO (Andrés Pérez y Yago Cagnacci)

* 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 (H₂)_N de base mínima, cuidando que la distancia entre dos moléculas H₂ 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.

MÉTODO Møller-Plesset DE ORDEN N (Germán Dima y Matías Roncoroni)

*Estudiar su convergencia

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

MODELO DE HÜCKEL (Mariano Marziali y Paula Gonzalez Seligra)

* Comenzar resolviendo el ejercicio 21 de la práctica 3

* Estudiar ciclos aromáticos y antiaromáticos y las Reglas de Hückel

OZONO -trabajo numérico- (María de las Mercedes Linares Moreau y Mariano Barella)

* Basarse en el artículo: Sotiris S. Xantheas, Gregory J. Atchity, Stephen T. Elbert, and Klaus Ruedenberg, J. Chem. Phys. 94 (12), 15 June 1991 "Potential energy surfaces of ozone. I "

ESPECTRO RAMAN (Santiago José Carreira y Rodrigo Martínez Gazoni)

- * Teoría, experimento y aplicaciones

Temas sin Elegir:

POLARIZABILIDAD MOLECULAR

- * Obtener la expresión del tensor de polarizabilidad electrónica molecular. Hallar su valor para H₂ 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.

OPERADOR DENSIDAD

- * Estudiar como se interpretan los autovalores enteros y los no enteros.
- * Relacionarlo con la correlación electrónica.

TEOREMA DE JAHN TELLER

Bibliografía: Landau.

ESPECTROSCOPIA DE RMN: APANTALLEMIENTO MAGNETICO NUCLEAR

- * Considere el Hamiltoniano que describe la interacción de los electrones de una molécula con un campo magnético externo B y con el producido por el momento magnético nuclear ' μ '.
 - * Aplicando teoría de perturbaciones (RSPT) hasta segundo orden, extraiga las correcciones a la energía que sean bilineales en B y en μ . Ellas representan la interacción entre el spin nuclear y el campo externo "mediada" por los electrones, lo que define el tensor de "apantallamiento magnético nuclear" .
 - * Busque en la bibliografía la definición del parámetro mencionado e investigue su orden de magnitud, así como la utilidad de esta espectroscopía y sus aplicaciones.
- Bibliografía: Molecular Quantum Mechanics, P.W. Atkins y R. S. Friedman.

HARTREE-FOCK ACOPLADO

Bibliografía: Methods of Molecular Quantum Mechanics. R. Mc Weeney and B. T. Sutcliffe. Academic Press, New York (1992).

CORRIMIENTO DE LAMB (sólo para "fanáticos")