

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 (posterior al recuperatorio).

Listado de Trabajos Especiales

ESPECTRO RAMAN (Elegido por: Gustavo Turiaci y Belén Farías)

* Teoría, experimento y aplicaciones

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

FOSFORESCENCIA Y FLUORESCENCIA (Elegido por: Federico Tesler y Lucas Frascini)

* Analice el Principio de Franck-Condon

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

CONSISTENCIA EN TAMAÑO (Elegido por: Federico Cerisola y Rebeca Falcione)

* 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.

CROMOFOROS (Elegido por: Laura Knoll y Laila Kazimierski)

* ¿Qué son?

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

Aún no elegidos:

MODELO DE HÜCKEL

* 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.

OZONO -trabajo numérico-

* 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 "

ACTIVIDAD OPTICA

* 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.

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

POLARIZABILIDAD MOLECULAR

* Obtener la expresión del tensor de polarizabilidad electrónica molecular.

Hallar su valor para H_2 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 del operador densidad reducida a primer orden.

* Relacionarlo con la correlación electrónica.

Bibliografía: "Density functional Theory of Atoms and Molecules", Yang y Parr

TEOREMA DE JAHN TELLER

Bibliografía: Landau.

SPIN-FLIP

* Basarse en el artículo: Anna I. Krylov, Chemical Physics Letters 338(2001) 375-384.

“Size-consistent wave functions for bond-breaking: the equation-of-motion spin-flip model”