

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,  $\beta_1$  y  $\beta_d$ , entonces  $\beta_1 = -\beta_d$ .

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”