

ESTRUCTURA DE LA MATERIA 3

TRABAJO PRACTICO COMPUTACIONAL Nro. 1

Parte 1: Función de estado RHF

Calcular la función de estado RHF para el sistema molecular en la base $STO - 3G$:

- Cálculo de la conformación geométrica (optimización). Energía.
- Energías orbitales y autovectores; analizar los signos y el significado de la expansión de estos últimos.

Parte 2: Función de estado ROHF

Calcular la función de estado ROHF para el sistema molecular⁺ en la base $STO - 3G$:

- *Idem Parte 1*
- Comparar con el caso anterior; que diferencias se observan y que se puede notar de estos resultados?

Parte 3: Potencial o energías de ionización

Evaluar la energía de ionización del sistema y explicar su significado.

- Por el teorema de Koopmans
- Por medio de las funciones de estado por separado, ese decir por la diferencia de energías. Explique el procedimiento y sus limitaciones.

recordando que el IP se define como

$$IP = \varepsilon_o^N - \varepsilon_o^{N-1}$$

donde ε_o^N y ε_o^{N-1} representan las energías "exactas" del sistema con N y $N - 1$ electrones respectivamente.

Evaluar las contribuciones (en caso de ser posible) si cada una de las energías definidas arriba se pueden escribir en contribuciones como sigue:

$$\varepsilon_o^N = E_o^N + E_{corr}^N$$

donde

$$\varepsilon_o^{N-1} = E_a^{N-1} + E_R^{N-1} + E_{corr}^{N-1}$$

siendo, E_o^N y E_a^{N-1} las energías de Hartree-Fock de los sistemas de N y $N - 1$ electrones respectivamente; E_{corr}^N y E_{corr}^{N-1} las energías de correlación de los sistemas de N y $N - 1$ electrones respectivamente; y E_R^{N-1} la energía de relajación correspondiente al uso de orbitales moleculares del sistema de N partículas en el sistema de $N - 1$.

Parte 4: Dependencia con la base

Realizar todo lo anterior en la base 6 - 31g* y 6 - 31g ** y analizar los cambios.

Dato: IP(exp)[...] = ... a.u.