

# Contenido

---

## 1-Breve Introducción a la Química Cuántica

Introducción	2
La ecuación de Schrödinger	2
La ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo	2
El operador hamiltoniano	2
La Ec. de Schrödinger independiente del tiempo 2	
La aproximación de Born-Oppenheimer	3
El teorema variacional	5
Ecuaciones básicas de la química cuántica	5
Las Ecs. de Hartree	5
Las ecuaciones de Hartree-Fock	8
Las ecuaciones de Roothaan	9
Funciones de base	11
Ejemplos de conjuntos de base usados actualmente	11
Funciones de polarización	12
Funciones difusas	12
Otros tipos de funciones de base	12
Análisis de la hiperficie de energía potencial	13
Puntos críticos en la HEP	13
Cálculo de propiedades electrónicas	15
Potenciales de ionización, afinidades electrónicas y energías de transición electrónica	15
Cargas eléctricas. Momentos dipolares, cuadrupolares y sus derivadas.	15



## 2-Correlación Electrónica

El problema de la correlación electrónica	20
Correlación electrónica introducida mediante un cálculo Hartree-Fock	20
Correlación electrónica introducida mediante la interacción de configuraciones	22
La energía de correlación y su introducción en los cálculos	24
Métodos de cálculo	25
Métodos variacionales	25

Métodos no variacionales	46
<b>3-Técnicas Experimentales Relacionadas</b>	
Resonancia Multifotónica	66
El espectro REMPI del NH	70
<b>4-El Espectro Electrónico del Agua</b>	
El espectro electrónico del agua	75
El espectro del dímero y la propuesta de esta tesis.	79
Metodología	81
Geometría de los sistemas estudiados	81
Métodos teóricos	81
<b>5-Desarrollo del Conjunto de Base</b>	
Introducción	86
Optimización de los exponentes difusos	86
Curvas de disociación	90
Variación de la estructura electrónica a través de la disociación.	95
El radical catión $\text{H}_2\text{O}^+$	97
Resumen	98
<b>6-El Espectro Electrónico del Dímero</b>	
Introducción	102
Energías de excitación en el dímero	102
Curvas de transferencia protónica.	105
El catión radical del dímero	111
Disociación del dímero	114
Resumen	119
<b>7-Dinámica del Sistema y Conclusiones Finales</b>	
Dinámica REMPI en el dímero	122
Conclusiones finales y perspectivas	125