



PROLOGO

1

FUNDAMENTO TEORICO

2

TEMA Planteamiento del problema y fundamentos mecánico-cuánticos. 3

Método de los orbitales moleculares. 9

Ecuaciones de Hartree Fock. 12

Aproximación LCAO-MO. Ecuaciones de Roothaan. 16

Energías de excitación y ionización. 19

PROFE Interacción de configuración. 23

Métodos de cálculo "ab initio". 31

Métodos que consideran todos los electrones de valencia. 34

Métodos que consideran los electrones pi. 42

Métodos simples LCAO-MO (Métodos de Huckel). 54

Cálculo de propiedades derivadas de la estructura electrónica. 60

METODOS DE CALCULO SEGUIDOS EN ESTA TESIS 83

GEOMETRIAS ADOPTADAS Y PARAMETROS SELECCIONADOS 91

RESULTADOS OBTENIDOS 96

Planillas de resúmenes de resultados numéricos P/1

Espectro del Benzofuroxano P/37

CONCLUSIONES. COMPARACION CON DATOS EXPERIMENTALES 99

BIBLIOGRAFIA B/1

NOTAS COMPLEMENTARIAS

Nota 1.-Generalidades sobre correlación electrónica. N(1)

Nota 2.-Aproximación de sobreposición <sup>diferencial</sup> nula (ZDO). N(2)

Nota 3.-Elementos matriciales de operadores mono y bi-electrónicos con funciones base AP-SMO. N(3)

Nota 4.-Orbitales atómicos ortogonalizados (OAO). N(4)

Nota 5.-Propiedades de invariancia y aproximaciones en el método CNDO. N(5)

Nota 6.-Elección de los parámetros en el método de Sichel y Whitehead. N(6)

Nota 7.-Método de la esfera cargada y su uso en el cálculo de integrales coulombianas. N(7)

Nota 8.-Cálculo de energías de promoción en átomos con 7 electrones s p. N(8)

Como consecuencia de dicho estudio, se determinarán los criterios distintos propiedades y se compararán con los datos experimentales cuando los hubiere