

Estudio teórico de los sistemas moleculares CH₅⁺, CH₅ y CH₅⁻. Energía y conformación geométrica de distintos estados estacionarios

Novoa Vide, Juan José

ADVERTIMENT. La consulta d'aquesta tesi queda condicionada a l'acceptació de les següents condicions d'ús: La difusió d'aquesta tesi per mitjà del servei TDX (www.tesisenxarxa.net) ha estat autoritzada pels titulars dels drets de propietat intel·lectual únicament per a usos privats emmarcats en activitats d'investigació i docència. No s'autoritza la seva reproducció amb finalitats de lucre ni la seva difusió i posada a disposició des d'un lloc aliè al servei TDX. No s'autoritza la presentació del seu contingut en una finestra o marc aliè a TDX (framing). Aquesta reserva de drets afecta tant al resum de presentació de la tesi com als seus continguts. En la utilització o cita de parts de la tesi és obligat indicar el nom de la persona autora.

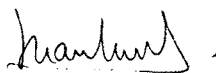
ADVERTENCIA. La consulta de esta tesis queda condicionada a la aceptación de las siguientes condiciones de uso: La difusión de esta tesis por medio del servicio TDR (www.tesisenred.net) ha sido autorizada por los titulares de los derechos de propiedad intelectual únicamente para usos privados enmarcados en actividades de investigación y docencia. No se autoriza su reproducción con finalidades de lucro ni su difusión y puesta a disposición desde un sitio ajeno al servicio TDR. No se autoriza la presentación de su contenido en una ventana o marco ajeno a TDR (framing). Esta reserva de derechos afecta tanto al resumen de presentación de la tesis como a sus contenidos. En la utilización o cita de partes de la tesis es obligado indicar el nombre de la persona autora.

WARNING. On having consulted this thesis you're accepting the following use conditions: Spreading this thesis by the TDX (www.tesisenxarxa.net) service has been authorized by the titular of the intellectual property rights only for private uses placed in investigation and teaching activities. Reproduction with lucrative aims is not authorized neither its spreading and availability from a site foreign to the TDX service. Introducing its content in a window or frame foreign to the TDX service is not authorized (framing). This rights affect to the presentation summary of the thesis as well as to its contents. In the using or citation of parts of the thesis it's obliged to indicate the name of the author.

UNIVERSIDAD DE BARCELONA

ESTUDIO TEORICO DE LOS SISTEMAS
MOLECULARES CH_5^+ , CH_5 Y CH_5^- .
ENERGIA Y CONFORMACION GEOMETRICA
DE DISTINTOS ESTADOS ESTACIONARIOS.

Memoria presentada para
optar al Grado de Doctor en
Ciencias Químicas por el
Licenciado
Juan José Novoa Vide



Barcelona, Junio de 1931

VII. B I B L I O G R A F I A

1. A. Messiah, Mecánica Cuántica, Ed. Tecnos, Madrid, 1973, 1ª edición reimpresa, Tomo II.
2. M. Born y J. R. Oppenheimer, Ann. Phys. (Leipzig), 84, 457 (1927).
3. cita 1, pág. 671.
4. P. O. Löwdin, Rev. Mod. Phys., 32, 328 (1960),
Adv. Chem. Phys., 2, 207 (1959).
5. M. A. Robb y R. H. A. Eade, NATO-ASI sobre "Computational Theoretic Organic Chemistry". Menton, Francia, 2- 15 Julio de 1980; I. Shavitt, Methods of Electronic Structure Theory, ed. H. F. Shaeffer III, Plenum, New York, 1977.
6. B. T. Sutcliffe, Computational Techniques in Quantum Chemistry and Molecular Physics, Reidel Publishing, Holland, 1975.
7. J. K. L. MacDonald, Phys. Rev., 43, 830 (1933); E. A. Hylleraas y B. Undheim, Z. Phys., 65, 759 (1930).
8. R. K. Nesbet, Rev. Mod. Phys., 33, 28 (1961).
9. R. McWeeny y B. T. Sutcliffe, Methods of Molecular Quantum Mechanics, Academic Press, New York, 1976, pág. 47- 51; J. C. Slater, Phys. Rev., 34, 1293 (1929).
10. Una deducción completa de las ecuaciones se encuentra en la Memoria de Licenciatura de J. J. Novoa, Univ. de Barcelona, 1978.

11. R. Carbó y J. M. Riera, A General SCF Theory, Lecture Notes in Chemistry, vol. 5, Springer-Verlag, Berlin, 1978, pág. 11 y ss.
12. F. W. Bobrowicz y W. A. Goddard III, Methods of Electronic Structure Theory, ed. H. F. Shaeffer III, Plenum, New York, 1977.
13. L. Brillouin, Actualites Sci. et Ind., nº 71 (1933), nº 159 (1934); C. Møeller y M. S. Plesset, Phys. Rev., 46, 618 (1934).
14. G. Herzberg, Molecular Spectra and Molecular Structure. III. Electronic Spectra and Electronic Spectra of Polyatomic Molecules. D. van Nostrand co. Princeton, 1966, pág. 297.
15. P. O. Löwdin, Adv. Chem. Phys., 14, 283 (1969), pág. 325.
16. A. C. Hurttley, Introduction to the Electron Theory of Small Molecules, Academic Press, London, 1976
17. M. Lax, Symmetry Principles in Solid State and Molecular Physics. John Wiley and Sons, New York, 1974, pág. 410.
18. M. A. Robb, comunicación privada.
19. P. O. Löwdin, Adv. Chem. Phys., 2, 207 (1959).
20. R. Pauncz, Spin Eigenfunctions. Construction and use, Plenum, New York, 1979, capítulo 2.
21. A. W. Joshi, Elements of Group Theory for Physicists, Wiley Eastern Ltd. New Delhi, 1977, 2ª ed, pág. 198.
22. P. A. M. Dirac, Proc. Roy. Soc. (London), A123, 714 (1929).

23. P. O. Löwdin, Calcul des Fonctions d'onde Moleculaire, CNRS, Paris, 1958, pág. 23.
24. Los operadores escalera \hat{A}_+ y \hat{A}_- , son operadores momento angular que al actuar sobre funciones propias de los operadores \hat{S}^2 y \hat{S}_z cumplen $\hat{A}_\pm \Psi(l) = a_\pm \Psi(l \pm 1)$, siendo l el momento angular de la función Ψ . Tienen la propiedad de ser unitarios.
25. D. R. Hartree, The Calculation of Atomic Structures, John Wiley and Sons, New York, 1957.
26. P. O. Löwdin, Phys. Rev., 97, 1509 (1955).
27. Y. G. Smeyers y L. Doreste Suarez, Int. J. Quantum Chem., 7, 687 (1973).
28. Y. G. Smeyers y G. Delgado Barrio, Int. J. Quantum Chem., 8, 733 (1974).
29. G. Berthier, Molecular Orbitals in Chemistry Physics and Biology, ed. P. O. Löwdin y B. Pullman, Academic Press, New York, 1964.
30. C. C. J. Roothaan, Rev. Mod. Phys., 32, 179 (1960).
31. R. Lefebvre, J. Chim. Phys., 54, 168 (1957).
32. R. K. Nesbet, Proc. Roy. Soc. (London), A230, 312 (1955).
33. J. L. Masse, Cahiers Phys. (Paris), 15, 453 (1961).
34. M. J. S. Dewar, J. A. Hashmall y C. G. Vernier, J. Am. Chem. Soc., 98, 1953 (1968); M. J. S. Dewar y N. Trinajstić, Chem. Comm., 646 (1970); M. J. S. Dewar y N. Trinajstić, J. Chem. Soc. A, 1220 (1971).
35. F. W. Birss y S. Fraga, J. Chem. Phys., 38, 2552 (1963).
36. K. Hirao y H. Nakatsuji, J. Chem. Phys., 59, 1457 (1973).

37. B. Levy y G. Berthier, Int. J. Quantum Chem., 2, 307 (1968).
38. Un conjunto completo de parámetros para casi todos los estados electrónicos de interés, pueden encontrarse en el apéndice A de la cita 11.
39. R. Caballol, R. Gallifa, J. M. Riera y R. Carbó, Int. J. Quantum Chem., 8, 373 (1974).
40. D. Peters, J. Chem. Phys., 57, 4351 (1972).
41. F. L. Pilar, Elementary Quantum Chemistry, McGraw-Hill, New York, 1968, capítulo de teoría matricial.
42. S. Huzinaga, J. Chem. Phys., 51, 3971 (1969).
43. R. Carbó, R. Gallifa y J. M. Riera, Chem. Phys. Lett., 30, 43 (1975).
44. cita 11, capítulo 10.
45. C. C. J. Roothaan, Rev. Mod. Phys., 23, 69 (1951).
46. G. G. Hall, Proc. Roy. Soc. (London), A208, 328 (1951).
47. Para una revisión exhaustiva, vease el trabajo de R. S. Mulliken en J. Chim. Phys., 46, 497 (1949).
48. cita 41, ecuaciones (13- 174) y ss.
49. deducida de la ecuación (69) de la cita 39.
50. J. C. Slater, Phys. Rev., 36, 57 (1930).
51. W. E. Duncanson y C. A. Coulson, Proc. Roy. Soc. (Edinburgh), 62, 37 (1944).
52. P. O. Löwdin y K. Appel, Phys. Rev., 103, 1746 (1956).
53. S. F. Boys, Proc. Roy. Soc. (London), A200, 542 (1950).

54. M. W. Schmidt y K. Ruedenberg, J. Chem. Phys., 71, 3951 (1979).
55. A. Rauk y I. G. Csizmadia, Canad. J. Chem., 46, 1205 (1968).
56. I. N. Levine, Quantum Chemistry, Allyn and Bacon, Boston, 1975, pág. 365, acuación (14.38).
57. R. E. Kari y I. G. Csizmadia, J. Chem. Phys., 63, 581 (1975).
58. Para una revisión, ver T. H. Dunning Jr. y P. J. Hay, Modern Theoretical Chemistry, vol. 3, ed. H. F. Shaeffer, Academic Press, New York, 1977.
59. R. E. Kari, P. G. Mezey y I. G. Csizmadia, J. Chem. Phys., 64, 632 (1976).
60. Un cálculo teórico de dicho límite se hace en la referencia 54.
61. F. B. van Duijneveldt, IBM Research Report RJ945 (1971).
62. S. Huzinaga y Y. Sakai, J. Chem. Phys., 50, 1371 (1969).
63. R. C. Raffanetti, J. Chem. Phys., 58, 4452 (1973).
64. QCPE nº 328
65. Recogido en la cita 58.
66. R. Ditchfield, W. J. Hehre y J. A. Pople, J. Chem. Phys., 52, 5001 (1970).
67. R. Ditchfield, W. J. Hehre y J. A. Pople, J. Chem. Phys., 54, 724 (1971).
68. S. Rothenberg y H. F. Shaeffer, J. Chem. Phys., 54, 2765 (1971).
69. T. Vladimiroff, J. Chem. Phys., 52, 1983 (1970).
70. M. J. S. Dewar, Chem. Brit., 11, 97 (1975).

71. R. E. Kari, Tesis Doctoral, Univ. de Toronto, 1969.
72. J. A. Pople, D. P. Santry y G. A. Segal, J. Chem. Phys., 43, S129 (1965).
73. I. Fisher-Hjalmars, Adv. Quantum Chem., 2, 25 (1965) y citas dadas en el trabajo.
74. J. A. Pople, Trans Faraday Soc., 49, 1375 (1953).
75. N. C. Baird y M. J. S. Dewar, J. Chem. Phys., 50, 1262 (1969).
76. M. J. S. Dewar y E. Haselbach, J. Am. Chem. Soc., 92, 590 (1970); N. Bodor, M. J. S. Dewar, A. Haget y E. Haselbach, J. Am. Chem. Soc., 92, 3854 (1970).
77. M. J. S. Dewar y D. H. Lo, J. Am. Chem. Soc., 94, 5296 (1972); N. Bodor, M. J. S. Dewar y D. H. Lo, J. Am. Chem. Soc., 94, 5303 (1972).
78. R. C. Bingham, M. J. S. Dewar y D. H. Lo, J. Am. Chem. Soc., 97, 1285, 1294, 1302, 1307 (1975).
79. L. Oleari, L. DiSipio y G. De Michelis, Mol. Phys., 10, 97 (1966).
80. D. Poppinger, Chem. Phys. Lett., 34, 332 (1975).
81. R. Fletcher (ed.), Optimization, Academic Press, London, 1969, pág. 215.
82. P. Pulay, Mol. Phys., 17, 197 (1969); 18, 473 (1970) .
83. D. M. Himmelblau, Applied Non-linear Programming, McGraw-Hill, New York, 1972.
84. P. D. Dacre, Chem. Phys. Lett., 7, 47 (1970).
85. QCPE nº 47.

86. I. Shavitt, Methods in Computational Physics, vol. II, Academic Press, New York, 1963.
87. P. O. Löwdin, Adv. Quantum Chem., 5, 185 (1970).
88. C. C. J. Roothaan y P. S. Bagus, Methods in Computational Physics, Academic Press, New York, 1963.
89. S. Manrique y M. Petit, Elementos de Cálculo Numérico, Publicaciones del Laboratorio de Cálculo de la Universidad de Barcelona, nº 15, Ed. Laboratorio de Cálculo, Barcelona, 1975.
90. P. Cremaschi y M. Simonetta, Theoret. Chim. Acta (Berl.), 37, 341 (1975).
91. K. Mokoruma y R. E. Davis, J. Am. Chem. Soc., 94, 1060 (1972).
92. Ver referencias en la cita 91.
93. F. H. Field, Acc. Chem. Res., 1, 42 (1968) y referencias dadas allí.
94. L. R. Anders, J. L. Beauchamp, R. C. Dunbar y L. Baldeschwieler, J. Chem. Phys., 45, 1062 (1966).
95. G. A. Olah y R. H. Schlosberg, J. Am. Chem. Soc., 90, 2720 (1968).
96. P. Ausloos, R. E. Rebbart y S. G. Lias, J. Chem. Phys., 42, 540 (1965).
97. M. D. Sefcik, J. M. S. Henis y P. P. Gaspar, J. Chem. Phys., 61, 4321 (1974).
98. D. C. McGilvery, J. D. Morrison y D. L. Smith, J. Chem. Phys., 68, 3949 (1978).
99. M. Riggin y R. C. Dunbar, Chem. Phys. Lett., 31, 539 (1975) ; B. Freiser, comunicación privada.

100. V. Dyczmons, V. Staemmler y W. Kutzelnigg, Chem. Phys. Lett., 5, 361 (1970)
101. P. K. Weiner, Tesis Doctoral, Univ. de Texas, 1976.
102. Se ha utilizado para los cálculos MINDO/3, el programa del mismo nombre puesto a punto por S. Olivella en el ordenador UNIVAC 1108 del Ministerio de Educación y Universidades. El programa, es una copia de la versión original de Dewar y col. Como criterios de finalización se han usado estos: a) Variación de la energía total entre ciclos menor que 10^{-4} eV, y todas las componentes del gradiente menores que 1 en las unidades eV/(Å o radian); b) El valor estimado del descenso de un ciclo a otro, de la energía es menor que 0.005 eV; c) Converge la energía total pero no el gradiente; d) Imposible encontrar un valor de la energía menor que el del punto inicial; e) No converge la energía total.
103. R. C. Bingham, M. J. S. Dewar y D. H. Lo, J. Am. Chem. Soc., 97, 1294 (1975).
104. M. J. S. Dewar, The Molecular Orbital Structure of Organic Chemistry, McGraw-Hill, New York, 1969.
105. M. J. S. Dewar y S. Olivella, J. Chem. Soc. Faraday Trans. II., 75, 829 (1979) y citas en el trabajo.
106. QCPE nº 239, puesto a punto en el FACOM 230/38S del Centro de Cálculo de la Universidad Politecnica de Barcelona por J. J. Perez Gonzalez.
107. V. Dyczmons y W. Kutzelnigg, Theoret. Chim. Acta (Berl.), 33, 239 (1974).
108. S. Yamabe, Y. Osamura y T. Minato, J. Am. Chem. Soc., 102, 2268 (1980).
109. M. A. Robb y col. Programa GUGA para cálculos MCSCF.

Puesto a punto en un ordenador CDC de "University of London Computer Center", modelo 6600.

110. E. Dalgaard y P. Jørgensen, J. Chem. Phys., 69, 3833 (1978).

111. H. Köhler y H. Uschka, J. Am. Chem. Soc., 101, 3479 (1979).

112. ORTEP(Oak Ridge Thermal Ellipsoid Plotter program).

Es un programa en FORTRAN para efectuar dibujos de sistemas moleculares, en general, mediante el uso de un ordenador conectado a una mesa de dibujo. Puesto a punto en el ordenador FACOM 230/28 del Centro de Cálculo de la Universidad Politecnica de Barcelona por Ignacio Fita.

R.18667