



XXVIII Comunicaciones Científicas y Tecnológicas

Orden Poster: CE-028 (ID: 2610)

Autor: Aucar, Juan Jose

Título: Correcciones dependientes del espín electrónico al gradiente de campo eléctrico con el formalismo LRESC

Director: Maldonado, Alejandro Fabián

Co-Director: Melo, Juan Ignacio

Palabras clave: Gradiente de Campo Eléctrica, Cuántica Relativista, Propiedades Moleculares

Área de Beca: Cs. Naturales Y Exactas

Tipo Beca: Conicet

Periodo: 01/04/2019 al 01/04/2024

Lugar de trabajo: Imit - Inst. De Modelado E Innovación Tecnológica

Proyecto: (PICT-2016-2936) Teorías y modelos novedosos para analizar y describir con máxima precisión propiedades magnéticas de sistemas atómicos y moleculares de tamaño pequeño y mediano.

Resumen:

Al trabajar con sistemas moleculares que contienen átomos pesados es imprescindible incluir efectos relativistas para describir correctamente sus propiedades. La magnitud de los mismos puede obtenerse aplicando distintos modelos, y en los últimos años hubo un incremento en el interés por desarrollar modelos más completos y precisos. En un contexto relativista, las propiedades físicas asociadas a operadores que conservan el número de partículas pueden ser obtenidas a partir de correcciones al estado fundamental no relativistas a través de la Teoría de perturbaciones de Rayleigh-Schrödinger (RSPT). En este contexto, el formalismo Linear Response Elimination of the Small Component (LRESC) fue presentado originalmente para estudiar el apantallamiento magnético nuclear como el valor no relativista más correcciones relativistas. Se estudia aquí el alcance del formalismo LRESC en la descripción del origen de las correcciones relativistas al gradiente de campo eléctrico incluyendo todas las correcciones tripletes a orden $1/c^4$ (siendo c la velocidad de la luz en el vacío). Se abordan moléculas bi-lineales HgX ($X = Cl, Br, I$) que habían sido estudiadas incluyendo el primer orden de aproximación. Los resultados del trabajo permiten discriminar cuáles son los principales mecanismos electrónicos responsables de los efectos relativistas en los sistemas estudiados. El formalismo LRESC provee un conocimiento significativo basado en operadores no relativistas bien conocidos. Los mecanismos electrónicos responsables de los efectos relativistas aparecen con claridad al aplicar el formalismo LRESC al EFG y puede ser analizada cada contribución por separado, o bien de manera global. El desempeño de la metodología LRESC es mejorado al incluir los términos dependientes del espín electrónico, respecto del primer trabajo en que se estudiaron estos sistemas.