



XXVI Comunicaciones Científicas y Tecnológicas

Orden Poster: CE-025 (ID: 2057)

Autor: Zapata Escobar, Andy Danian

Título: LRESC con Orbitales Moleculares Localizados

Director: Aucar, Gustavo

Palabras clave: Orbitales Moleculares, LRESC, Relatividad, Apantallamiento Magnético

Área de Beca: Cs. Naturales Y Exactas

Tipo Beca: Conicet

Periodo: 01/04/2018 al 31/03/2023

Lugar de trabajo: Facultad De Cs. Exactas Y Naturales Y Agrimensura

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:

Directores: Gustavo A Aucar, Alejandro F Maldonado

Los orbitales moleculares localizados, OML, como son los orbitales enlazantes y antienlazante [1] permiten describir procesos moleculares mediante funciones de onda monoelectrónicas. Con ellos se logra entender de manera más intuitiva la conducta de ciertos mecanismos electrónicos subyacentes a propiedades de respuesta molecular a la acción de campos electromagnéticos externos. Dichos OML se pueden expresar en un marco relativista o no relativista. Cuando el estudio involucra átomos semipesados o pesados (a partir de la 4ta fila de la tabla periódica), es indispensable incluir la relatividad en la descripción del sistema de interés.

En esta comunicación se muestra los resultados preliminares de la aplicación de un desarrollo reciente del modelo LRESC (linear response with elimination of small components) al cálculo de apantallamientos magnéticos nucleares de diferentes sistemas moleculares [2]. Este modelo (que utiliza teoría de perturbaciones) permite calcular propiedades de respuesta utilizando una función de onda no relativista y correcciones relativistas a diferentes órdenes en potencias de la velocidad de la luz. El término de menor orden corresponde al valor no relativista. Cuando el modelo LRESC se aplica al cálculo del apantallamiento magnético nuclear, las correcciones relativistas pueden separarse en dos grupos: i) correcciones asociadas al core y ii) correcciones asociadas al ambiente químico [3]. Esto produce grandes ventajas en el análisis de esta propiedad magnética.

Teniendo en cuenta los OML junto con el modelo LRESC se puede describir de manera más específica los diferentes mecanismos electrónicos asociados con el ambiente químico. De esta manera se logra establecer cuales son los orbitales de valencia responsables del apantallamiento o desapantallamiento de los átomos, e indicar también cuales son los que más contribuyen al efecto de un átomo pesado sobre otro pesado vecino, denominado HAVHA [4].

Referencias

- [1] L. Pauling. General Chemistry. Dover Publications. 3rd Revised ed. edition, 1988.
- [2] J. I. Melo, M. C. Ruiz de Azúa, C. G. Giribet, G. A. Aucar y R. H. Romero, J. Chem. Phys. 2003, 118, 471.
- [3] A. F. Maldonado, G. A. Aucar y J. I. Melo, J. Mol. Model. 2014, 20, 2417.
- [4] A. F. Maldonado y G. A. Aucar, Phys. Chem. Chem. Phys. 2009, 11, 5615.