



UNIVERSIDAD NACIONAL D. MEXICO
Universidad Nacional Autónoma de México

FACULTAD DE QUIMICA

148

ESTUDIO TEORICO DEL PIRROL POR EL METODO
CELULAR DE DISPERSION MULTIPLE X ALFA BETA.

T E S I S

Que para obtener el título de:

Q U I M I C O

p r e s e n t a :

RAUL ROBERTO VARELA GOMEZ



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

TESIS 1978
M.C. ~~426~~ 424
ECHA 421
ROC
S



Jurado asignado originalmente
según el tema

PRESIDENTE Marcela Cejudo V.

VOCAL Gisela Hernandez

SECRETARIO Andoni Garritz R.

1er. SUPLENTE Jose Luis Gázquez M.

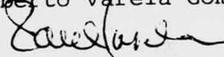
2do. SUPLENTE Diana Cruz V.

Sitio donde se desarrolló el tema:

Departamento de Química Teórica
División de Estudios Superiores
Facultad de Química
U.N.A.M.

Nombre completo y firma del sustentante:

Raúl Roberto Varela Gómez



Nombre completo y firma del asesor del tema:

Andoni Garritz Ruiz



A mi padre con cariño.

Agradecimientos.

Quisiera agradecer profundamente al Dr. Jaime Keller por la oportunidad de colaborar en el Departamento de Química Teórica y por el apoyo que siempre me ha brindado.

Al Dr. Andoni Garritz debo agradecer el haberme enseñado el IF y el GO TO y todas las consecuencias que esto trajo incluyendo esta tesis.

Imposible dejar de agradecer el compañerismo sin el cual este trabajo no se hubiera completado, compañerismo que me brindaron en Química Teórica y en Computación. A todos ustedes compañeros y amigos muchas gracias

INDICE.

I.	Introducción	1
II.	Breve Descripción del Método	4
III.	Potencial de Intercambio	10
IV.	El Estado de Transición	14
V.	Resultados	17
VI.	Conclusiones	25
VII.	Referencias	28
VIII.	Figuras	31

I.- INTRODUCCION

En los últimos años en el Departamento de Química Teórica de la División de Estudios Superiores de la Facultad de Química, se ha investigado la aplicación de la teoría de dispersión múltiple usando intercambio estadístico^{1.2.3.4.5.6.7} a sistemas de interés químico.

Para estudios teóricos de moléculas, se ha hecho uso del método Celular de Dispersión Múltiple $X_{\alpha\beta}$ (CDMX $_{\alpha\beta}$)⁸.

Los resultados obtenidos por éste método, se comparan satisfactoriamente con los de otros métodos teóricos y con datos experimentales.

Por otro lado, el método CDMX $_{\alpha\beta}$, siendo un método a primeros principios, ha probado ser considerablemente más económico, en cuanto a tiempo de computadora requerido, que un método Ab-Initio, por lo que se presenta como una alternativa para aquellos casos en los que un cálculo teórico tradicional resultaría poco práctico.

El presente trabajo forma parte de la investigación encaminada a determinar la confiabilidad del método cuando se aplica a moléculas planas. Caso en el cual las aproximaciones implícitas resultan de tal naturaleza, que es importante establecer claramente sus efectos en los resultados.

Para ubicar razonablemente nuestros resultados, con respecto a los de otros cálculos teóricos, se escogió a la molécula de pirrol, en virtud de que acerca de ella existe abundante información tanto teórica como experimental.

Se presentan, pues, los resultados obtenidos para el pirrol al aplicar el método $CDMX_{\alpha\beta}$, y las conclusiones que se obtienen al compararlos con los datos teóricos y experimentales existentes. También se presenta una breve discusión del método $CDMX_{\alpha\beta}$.

II.- BREVE DESCRIPCION DEL METODO

El método está basado en la descomposición hipotética de la materia en cúmulos, los cuales son unidades características de átomos. Junto con el medio ambiente, una unidad se considera que representa una situación física, tal como una molécula en fase gaseosa, un arreglo atómico típico en una macromolécula o un conjunto de átomos en un cristal. Para introducir en cierta medida el efecto del medio, se rodea al cúmulo con una esfera artificial que se denominará esfera exterior.

El espacio se divide en tres tipos de regiones, como se muestra en la figura 1. Estas regiones se denominan:

I) Atómica: Es el espacio contenido dentro de las esferas centradas en los núcleos.

II) Interatómica: Comprende la zona entre las regiones atómicas y la esfera exterior que rodea al cúmulo.

III) Extramolecular: La región fuera de la esfera exterior.

Keller^{9,10} (1971) propuso la inclusión de un cuarto tipo de región consistente en esferas huecas (sin núcleo en el centro), como se muestra en la figura 2 con líneas punteadas, para mejorar la descripción en la región interatómica.

En este sistema, así definido, estamos interesados en resolver la ecuación de Schrödinger de un electrón dentro de cada una de las regiones I, II, III para un potencial local (en Rydbergs).

$$\left[-\nabla^2 + V(r) \right] \psi(r) = \epsilon \psi(r) \quad (1)$$

donde

$$V(r) = V_c(r) + V_{xc}(r) \quad (2)$$

incluyendo $V(r)$ la contribución coulombica $V_c(r)$ y aquella local para el intercambio y la correlacion $V_{xc}(r)$.

Para resolver (1) en cada región, considerando $V(r)$ como un potencial local, siempre podremos escribir

$$\psi(r) = \sum_{L} \hat{V}(r) Y_L(r) \quad (3)$$

donde $L = (l, m)$

La primera aproximación que se hace con respecto al potencial es tomar unicamente los términos (0,0) de la expansión para las regiones I y III, lo cual equivale a considerar al potencial como esféricamente simétrico. En la región II se aproxima al potencial por una constante, numéricamente igual a su promedio sobre el volumen interatómico.

En este punto es necesario definir con precisión la geometría con que vamos a caracterizar al cúmulo. Esto se ha hecho siguiendo tres diferentes criterios, mismos que se describen a continuación:

a) Esferas tangentes. Esta es la aproximación llamada "Muffin-Tin" (figura 1)

b) Esferas traslapantes^{11,12} Los radios de las esferas en la geometría de "Muffin-Tin" se hacen crecer sin importar que una determinada zona del espacio esté contenida en dos regiones diferentes.

c) Celdas. Las regiones son celdas ajenas que en principio pueden tomar cualquier forma, aunque en la práctica se usan esferas cortadas por planos. Por ejemplo en la figura 3 se tendría la geometría celular para una molécula diatómica. Alrededor de los centros atómicos se trazan esferas de un radio mayor a la mitad de la longitud de enlace y se truncan con un plano que contiene a la intersección de ambos.

Las soluciones de (1) en las regiones I y III se realizan numericamente, mientras que en la región II la solución es analítica.

En el lenguaje de dispersión múltiple se usa el término dispersor para cada una de las regiones I en el cúmulo y a la solución $\psi_{II}(r)$ en la región interatómica se le divide en una onda incidente y una onda dispersada o sea

$$\psi_{II}(r) = \psi_{inc}(r) + \psi_{disp}(r)$$

Una vez que se tienen las soluciones en cada una de las regiones del cúmulo, se usa el formalismo de dispersión múltiple para casarlas sobre la superficie de las esferas, haciéndose lo mismo con sus primeras derivadas. Una vez hecho esto, se requiere que la onda incidente en una región dada sea igual a la dispersada por todas las demás regiones.

Así se llega a un sistema lineal homogéneo de ecuaciones que sólo tendrán solución cuando el determinante de los coeficientes valga cero.

Una descripción detallada, que incluyera ecuaciones, del párrafo anterior implicaría tratar con la teoría de funciones especiales y de Green^{13.14}, que por su complejidad no se discuten en este trabajo.

Para reducir el tiempo computacional se aprovechan las características de simetría de la molécula.

Ya que el determinante secular depende de la energía, se hace el cálculo suponiendo unos eigenvalores iniciales para cada estado. Como segundo paso, estos eigenvalores se modifican hacia arriba y hacia abajo del valor inicial hasta que se encuentre el cero del determinante secular.

A partir de las funciones de onda así calculadas, se e-

valúa la densidad electrónica total de la siguiente manera:

$$\rho(r) = \sum_i n_i \psi_i^*(r) \psi_i(r) \quad (5)$$

donde n_i es la ocupación del orbital i ésimo.

A partir de $\rho(r)$ se obtiene la energía total del sistema.

La parte coulombiana de este nuevo potencial está dada por:

$$V_c(r) = \int \frac{2\rho(r')}{|r - r'|} d\tau'$$

El cálculo del potencial de intercambio de la fórmula (2) se describe en la siguiente sección.

Con este nuevo potencial se calculan unas nuevas funciones de onda monoeléctricas y a partir de ellas se obtiene una nueva densidad, repitiéndose este procedimiento hasta alcanzar la autoconsistencia.

III.- POTENCIAL DE INTERCAMBIO

Para introducir en (1) un potencial local, se hace uso de la aproximación estadística del potencial de intercambio introducida por Slater¹⁵ en 1951.

Esta aproximación en su forma original propone la sustitución del potencial de intercambio no local que aparece en Hartree-Fock por la siguiente expresión:

$$V_{xS}(\tau) = -6 \left[\frac{3}{8\pi} \rho(\tau) \right]^{1/3}$$

la cual corresponde a la energía de intercambio promedio calculada para un gas de electrones libres por Dirac¹⁶ y Bloch¹⁷. Posteriormente Gaspar¹⁸ y Kohn y Sham¹⁹ obtienen mediante un procedimiento variacional:

$$V_{xKS}(\tau) = \frac{2}{3} V_{xS}(\tau)$$

para el promedio del intercambio de Hartree-Fock para electrones libres.

Actualmente se conoce como método X_{α} a aquél que aproxima el potencial de intercambio como:

$$V_{x\alpha}(\tau) = \alpha V_{xS}(\tau)$$

donde α es solamente parámetro.

Para la determinación de α existen diferentes criterios; sin embargo, es generalmente aceptado que α no es una constante y que toma diferentes valores para diferentes átomos, valores que van desde $2/3$ hasta 1.

De lo anterior se deduce que un cálculo molecular que emplee el método X_α y que involucre átomos de diferentes especies requerirá necesariamente diferentes valores de α .

Por otra parte, es deseable, en un cálculo a primeros principios, no depender de la parametrización. Se puede lograr, para un potencial estadístico de intercambio, la independencia de la parametrización a través del esquema $X_{\alpha\beta}$ propuesto por Herman y colaboradores²⁰, en donde tenemos:

$$V_{X_{\alpha\beta}}(r) = [\alpha + \beta G(\rho)] V_{X_S}(r)$$

donde

$$G(\rho) = \frac{1}{\rho^{2/3}} \left[\frac{4}{3} \left(\frac{|\nabla\rho|}{\rho} \right)^2 - \frac{2\nabla^2\rho}{\rho} \right]$$

y $\rho = \rho(r)$ es la densidad electrónica.

Se ha demostrado que la inclusión de $G(\rho)$ hace posible fijar ambos parámetros (α y β) como sigue:

$\alpha = 2/3$ y $\beta = 0.0025$, quedando éstos entonces como parámetros univ-
ersales.

IV.- EL ESTADO DE TRANSICION

Al efectuar un cálculo empleando la técnica descrita, se puede probar que los valores ϵ_i obtenidos para los diferentes estados en el cúmulo están relacionados con la energía total y la ocupación (n_i) de la siguiente manera:

$$\epsilon_i = \frac{\partial E_{\text{TOTAL}}}{\partial n_i}$$

esta propiedad de los valores de la energía orbital resulta sumamente útil cuando se quieren calcular energías de ionización, las cuales corresponden a la diferencia de energía total entre el átomo y el ión. En nuestro caso hacemos uso de el concepto de estado de transición para calcular energías de ionización.

Para ilustrar el fundamento de esta técnica, haremos uso de la figura 4. Si observamos esta figura, notaremos que la pendiente de la línea correspondiente a $\Delta E/\Delta n_i$ es casi la misma que la pendiente en el punto medio. Si $\Delta n_i = 1$ (que es la diferencia en ocupación entre el ión y el estado basal), entonces podremos decir que la pendiente en el punto medio, en este caso cuando n_i vale 0.5 menos que n_i en el estado basal, constituye una buena aproximación a la energía de ionización de el estado i ésimo. Por lo tanto, el eigenvalor del estado i en un cálculo en el cual se reduzca su ocupación en 0.5 electrones, corresponde al potencial de ionización.

Desde luego, la validez de lo anterior depende de la forma que tome la energía total como función de n_i . Se ha demostrado²² que en la expansión de la energía total en serie de potencias de n_i , los términos de orden mayor que 2 son en general pequeños. Si la energía total como función de n_i fuera una parábola, el valor obtenido por el estado de transición sería ΔE . De lo anteriormente dicho se deduce que el estado de transición constituye una muy buena aproximación a el potencial de ionización, la cual además incluye los efectos de relajación al combinar los estados inicial y final.

Desde un punto de vista computacional, el estado de transición tiene la ventaja de ser económico en cuanto a tiempo requerido y sencillo en cuanto al procedimiento seguido.

V.- RESULTADOS

En la siguiente sección se presentan y discuten los resultados obtenidos para el pirrol.

El método $CDMX_{\alpha\beta}$ es un método a primeros principios, auto-consistente, que toma en cuenta a todos los electrones. Al lector interesado en los procedimientos computacionales involucrados, así como en los detalles de los programas de computadora usados, se le sugiere consultar las referencias 23 y 24.

El pirrol (C_4H_5N), por otro lado, es una molécula heterocíclica, plana, con 36 electrones, la cual para efectos del cálculo se presenta como un cúmulo con 10 esferas atómicas y una esfera exterior.

Para este cálculo, se usaron los valores de $\alpha = 0.6666$ y $\beta = 0.0025$, para estos parámetros universales incluidos en el potencial de intercambio.

El pirrol pertenece al grupo puntual C_{2v} , por lo que la construcción de los orbitales moleculares se basó en las diferentes representaciones irreducibles de dicho grupo.

Los cálculos se llevaron a cabo en una computadora Burroughs B6700, usando el programa CELLU/GOR. Para la obtención de las funciones monoeléctricas del estado basal se requirió de un tiempo de procesador de 45 minutos aproximadamente.

La geometría del pirrol puede verse en la figura 6. Para este cálculo, se usó el conjunto de coordenadas y radios mostrados en la tabla 1, el cual corresponde a las distancias y ángulos de equilibrio de la molécula. Las unidades usadas son unidades atómicas.

La nomenclatura que se encuentra en la tabla 1 corresponde a la indicada en la figura 6.

TABLA 1

celda	x	y	z	radio
1 out	0.0	0.0	1.794	5.2549
2 N	0.0	0.0	3.982	1.7493
3 C1	0.0	2.118	2.493	1.5900
4 C2	0.0	1.339	0.0	1.5900
5 HN	0.0	0.0	5.864	0.7900
6 H1	0.0	3.984	3.301	0.9954
7 H2	0.0	2.565	-1.623	0.9954
8 C1	0.0	-2.118	2.493	1.5900
9 C2	0.0	-1.339	0.0	1.5900
10 H1	0.0	-3.984	3.301	0.9954
11 H2	0.0	-2.565	-1.623	0.9954

Al tener las funciones orbitales para el estado basal de este cúmulo, nos es posible obtener la carga dentro de cada celda y aquélla que se encuentre localizada en la esfera exterior. Los valores obtenidos para la carga en cada esfera se reportan en la tabla 2.

Tabla 2

ESFERA	CARGA
1	0.56100
2	6.33200
3	4.71600
4	5.09700
5	0.71154
6	0.35910
7	0.43000
8	4.71600
9	5.09700
10	0.35910
11	0.43000

En este cálculo se obtuvo para la carga en la región intersticial el valor de 7.190.

La comparación de estos resultados con los obtenidos por un análisis de población resultaría inadecuada, en virtud de

que se manejan conceptos diferentes en cada caso.

Baste señalar que nuestros resultados dependen del tamaño de las celdas, y que en nuestro caso existe una carga intersticial y una carga en la esfera exterior lo cual no tiene equivalente en lo reportado por otros métodos teóricos.

En la tabla 3 se presentan los valores obtenidos usando la técnica del estado de transición y se comparan con otros datos teóricos obtenidos por diversos métodos²⁶.

El tiempo de computadora empleado para obtener un estado de transición a partir del estado basal, fué aproximadamente de 30 minutos (tiempo de procesador). Si se quiere, por otro lado, obtener un estado de transición a partir de otro estado de transición, se ocupará aproximadamente 10 minutos de tiempo de procesador.

En este caso se hicieron únicamente los cálculos de estado de transición para los estados 10 y 12 de nuestro cálculo, que corresponden a los estados $1a_2$ y $2b_1$ respectivamente.

Cabe hacer notar que nuestros resultados tienen validez para todos los orbitales, mientras que, tratándose de resultados de cálculos Hartree-Fock, el teorema de Koopmans es aplicable, únicamente, a los orbitales más externos.

Energías en Rydbergs

Estado	Ab Initio ₁	Ab Initio ₂	CNDO/2	INDO	XHMO	ARCANA	CELLU/ GOR
1a ₁	-31.2152	-31.4200					-29.419
2a ₁	-22.5334	-22.8504					-20.930
3a ₁	-22.4468	-22.7586					-20.358
4a ₁	-2.6111	-2.6477	-3.9028	-3.9572	-2.1713	-2.2491	- 3.3175
5a ₁	-2.1028	-2.1910	-2.7412	-2.7752	-1.7790	-1.7425	- 2.896
6a ₁	-1.5964	-1.6502	-2.0519	-2.0343	-1.3206	-1.2959	- 1.921
7a ₁	-1.4793	-1.5557	-1.9765	-1.9627	-1.1468	-1.1609	- 1.378
8a ₁	-1.1940	-1.2952	-1.2809	-1.2599	-0.4653	-0.9493	- 0.9668
9a ₁	-1.0579	-1.1531	-1.1944	-1.1656	-0.8708	-0.8848	- 0.86720
3b ₂	-1.9675	-2.069	-2.5277	-2.5497	-1.6635	-1.6461	- 2.0702
4b ₂	-1.5374	-1.594	-1.9727	-1.9615	-1.2804	-1.2380	- 1.7236
5b ₂	-1.1688	-1.2486	-1.2781	-1.2516	-0.9858	-0.9883	- 1.4426
6b ₂	-1.094	-1.2044	-1.1674	-1.1420	-0.9009	-0.8885	- 1.2690
1b ₁	-1.1413	-1.2627	-1.7750	-1.7168	-0.9888	-1.1509	- 1.5728
2b ₁	-0.6982	-0.85058	-0.9805	-0.9183	-0.8231	-0.8471	- 0.74260
1a ₂	-0.59800*	-0.7758	-0.8587	-0.8068	-0.7569	-0.7967	- 0.444

Como podemos ver en la tabla 3, nuestros resultados se pueden comparar cuantitativamente con los obtenidos por otros métodos. Por otro lado, el orden de los eigenvalores es el mismo para todos los casos.

Los resultados experimentales obtenidos por el método de espectroscopía fotoelectrónica²⁷ para el potencial de ionización, muestran los siguientes valores: para el estado $1a_1$, 0.6036 Ry. y para el estado $2b_1$, 0.6985 Ry.

En la tabla 3 comparamos nuestros resultados con los obtenidos por 2 diferentes cálculos Ab-Initio. El cálculo Ab-Initio₁²⁸ es el más reciente y obtiene el mejor resultado teórico de los que aquí reportamos. El cálculo Ab-Initio₂²⁹ fue el primer cálculo teórico de este tipo que se hizo del pirrol. Para dar una mejor idea de como se comparan nuestros resultados con los de estos dos cálculos Ab-Initio presentamos la figura 5.

Debemos considerar que, por las características de los métodos comparados, no tomamos en cuenta las energías totales obtenidas por los métodos semiempíricos, los cuales no consideran a todos los electrones.

La comparación entre los resultados de energía total obtenida por lo métodos Ab-Initio y nuestro resultado se podrá apreciar en la tabla 4.

TABLA 4

Energías totales en Rydbergs

AB-INITIO ₁	AB-INITIO ₂	CDMX _{αβ}
-417.552	-415.8627	-417.517

VI.- CONCLUSIONES

Se ha hecho un cálculo CDMX₁₈ para la molécula de pirrol, la cual, por sus características geométricas, da lugar a un cúmulo, en el que la relación entre el volumen intersticial y el volumen de todas las regiones atómicas de la molécula es grande (aprox. 5 a 1). Siendo precisamente la región intersticial la peor descrita por el método, se corre el peligro de fallar en el intento de encontrar una función de onda que describa al cúmulo, o de obtener resultados inaceptables.

No obstante, cuando comparamos nuestros resultados para el potencial de ionización con los de otros métodos teóricos y con aquellos obtenidos experimentalmente, podemos apreciar que sólo hay un cálculo Ab-initio que reproduce mejor que CELLU/GOR los resultados experimentales y que nuestros resultados son mejores, en este sentido, que los de otro Ab-initio y, desde luego, que los de cualquier método semiempírico. Al observar y comparar las energías totales, podemos ver que nuestro resultado se encuentra entre los dos Ab-initio.

Con respecto a las cargas en las celdas, podemos concluir que es en este aspecto donde las características especiales del problema afectan los valores obtenidos. El problema principal estriba en el hecho de existir más de 7 electrones en la región intersticial y no haber manera de localizarlos en región alguna del cúmulo.

Teniendo en cuenta que el cálculo CDMX²³ de una molécula con las características del pirrol se hizo en una computadora lenta, podemos concluir que se ha obtenido un resultado razonablemente satisfactorio con un esfuerzo computacional menor que el requerido por otros métodos que generan resultados comparables.

Se concluye también que el método responde satisfactoriamente aún en situaciones difíciles y que se puede aplicar confiablemente a sistemas como el del caso que nos ocupa.

Para reforzar lo anteriormente dicho, se dan referencias²⁴ en donde se podrán encontrar resultados obtenidos por este método aplicado a moléculas planas.

VII.- REFERENCIAS

Referencias.

- (1) K.H. Johnson, J. Chem. Phys. 45, 3085 (1966).
- (2) K.H. Johnson, Intern. J. Quantum Chem. 1S, 361 (1967).
- (3) F.C. Smith Jr. y K.H. Johnson, Phys. Rev. Letters 22, 1168 (1969).
- (4) K.H. Johnson, Intern. J. Quantum Chem. 4S, 153 (1971).
- (5) K.H. Johnson y F.C. Smith Jr., Phys. Rev. B5- 831 (1972).
- (6) K.H. Johnson, Advan. Quantum Chem. 7, 143 (1973).
- (7) L. Eyges, Phys. Rev. 111, 683 (1958).
- (8) J. Keller, Intern. J. Quantum Chem. 9, 583 (1975).
- (9) J. Keller, J.Phys. C:Solid State Physics 4, L85, 3143 (1971).
- (10) R. Evans y J. Keller, J. Phys. C:Solid State Physics 4, L85, 3143 (1971).
- (11) N. Rosch, W.G. Klemper y K.H. Johnson, Chem. Phys. Letters 23, 149 (1973).
- (12) F. Herman, A.R. Williams y K.H Johnson, J. Chem. Phys. 61, 3508 (1974).
- (13) J.W.D. Connolly y J.R. Sabin, J. Chem. Phys. 56, 5529 (1972).
- (14) P. Weiss, J. Phys. 6, 667 (1907).
- (15) J.C. Slater, Phys. Rev. 81, 385 (1951).
- (16) P.A.M. Dirac, Proc. Cambridge Phil. Soc. 26, 376 (1930).
- (17) F. Bloch, Z Physik 57, 545 (1929).
- (18) R. Gaspar, Acta Phys. Acad. Sci. Hung. 3, 236 (1954).

- (19) W. Kohn y L.J. Sham, Phys. Rev. 140, A1133(1965).
- (20) F. Herman, J. Van Dyke e I.B. Ortenburger, Phys. Rev. Letters, 22, 807(1969).
- (21) J.C. Slater, I.B. Mann, T.M. Wilson y J.H. Wood, Phys. Rev. 184, 672(1969).
- (22) J.C. Slater y J.H. Wood, Intern.J. Quantum Chem. 45, 3(1971).
- (23) D. Liberman e I.P. Batra "Multiple Scattering Program Descriptions", Reporte IBM # RJ1224(1973).
- (24) F.M. de J. Castro Martinez, "Optimización del espacio real molecular en cálculos de dispersión múltiple(X-alfa,Beta-Celular) y algunas aplicaciones". Tesis profesional, Facultad de Química UNAM.
- (25) A. Garritz, J.L. Gázquez, M. Castro y J. Keller, en prensa, Chem. Phys.
- (26) J.J. Kaufman, J.T. Preston, E. Kerman L. C. Cusachs Internat.J.Quant. Chem. 7S, 249(1973).
- (27) P. J. Derrick, L. Asbrink, O. Edqvist, B.-O. Jonsson y E. Lindholm, Internat.J. Mass. Spectrom. Ion Phys. 6, 191 (1971).
- (28) E. Clementi, H. Clementi y D. R. Davis, J. Chem. Phys. 46, 4725(1967).
- (29) H.J. T. Preston y J. J. Kaufman, Internat.J Quantum Chem. 7S, 207(1973).

VIII.-FIGURAS

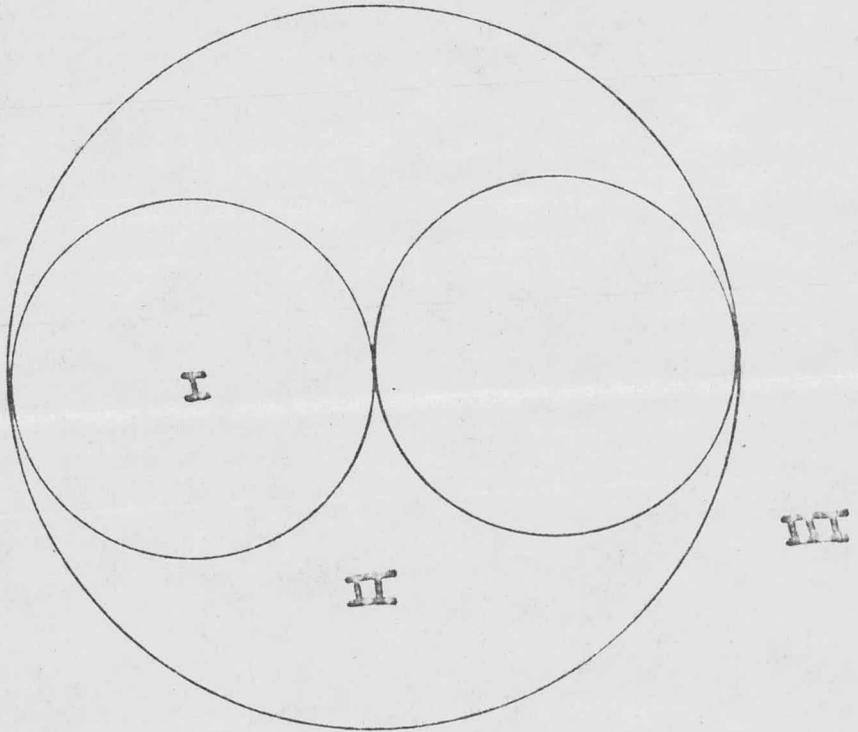


FIGURA 1

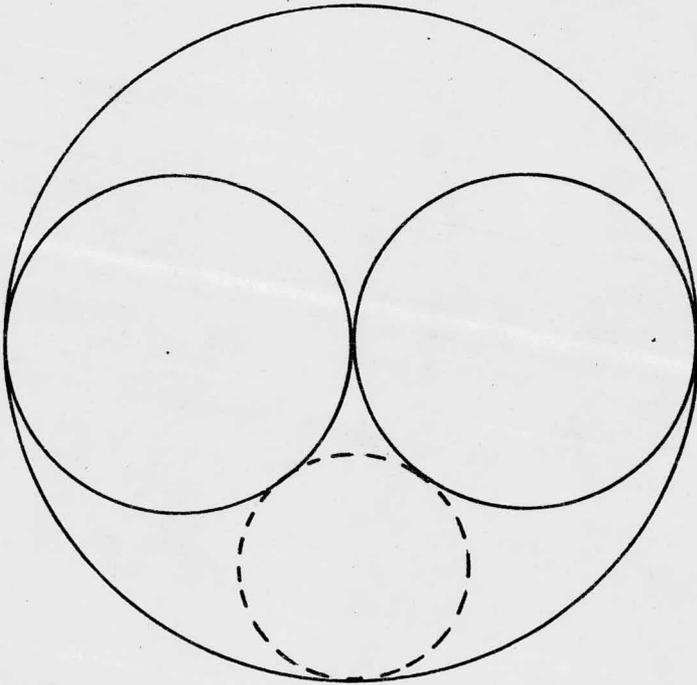


FIGURA 2

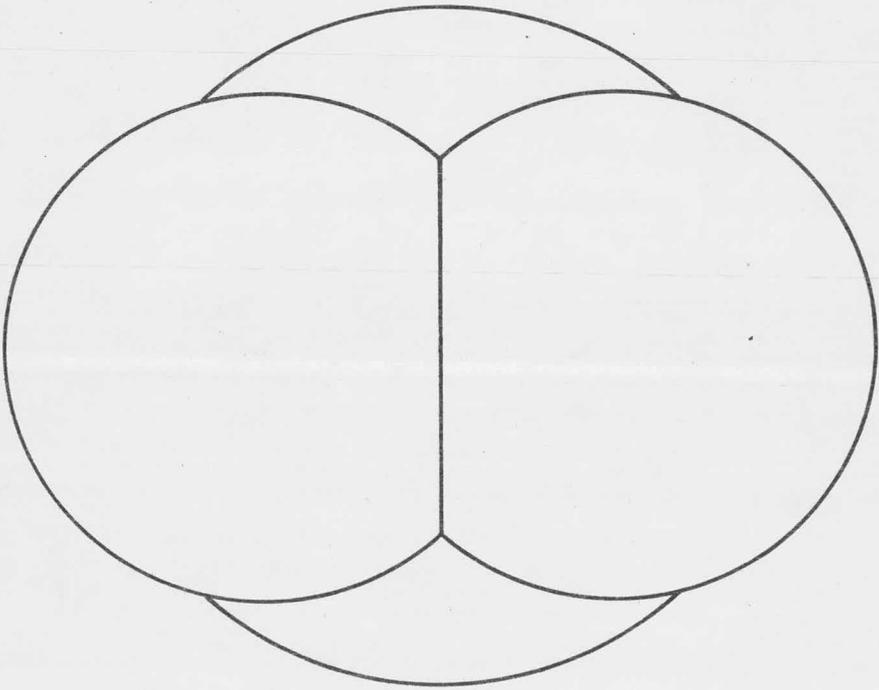


FIGURA 3

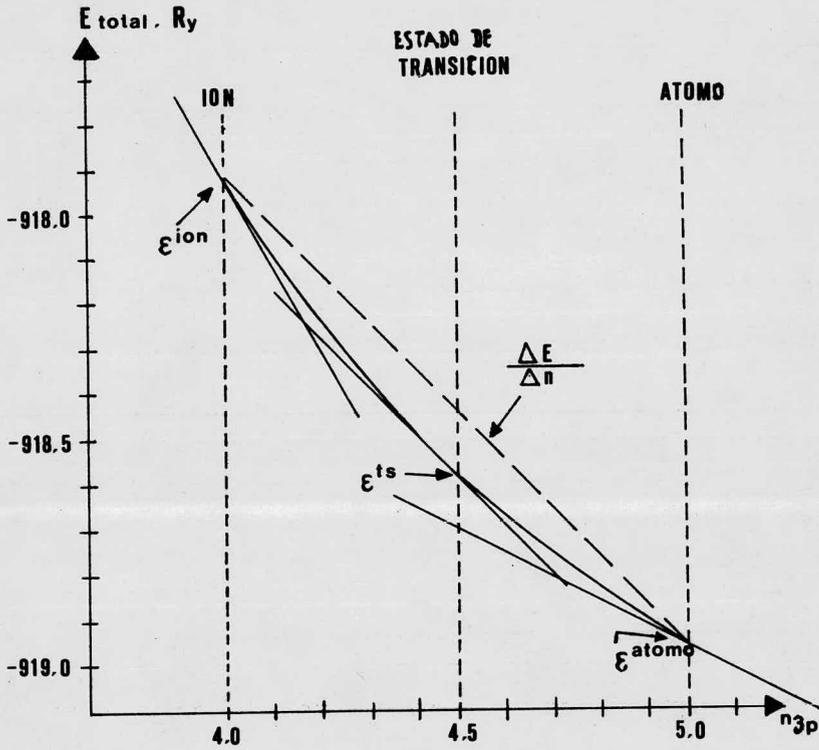


FIGURA 4

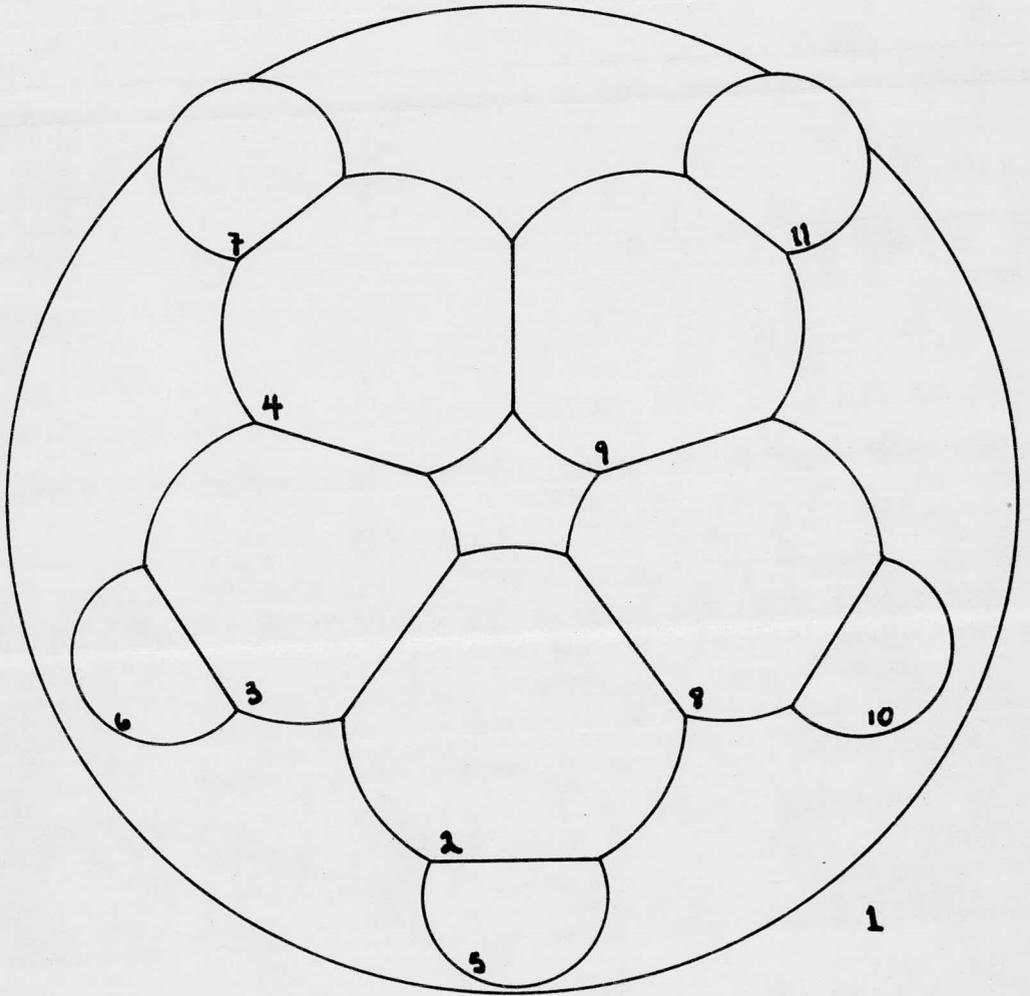


FIGURA 6



Impresiones Lupita

MEDICINA No. 25
FRACC. COPILCO UNIVERSIDAD
CIUDAD UNIVERSITARIA, D. F.
TEL. 548-49-79