

Métodos Novedosos Para Calcular e Interpretar Energías de Ionización, Electroafinidades y Orbitales de Dyson con Aplicaciones a los Aniones Doble Rydberg

J. V. Ortiz

Departamento de Química y Bioquímica

Universidad de Auburn

Auburn AL 36830 EE UU

La teoría *ab initio* del propagador del electrón ofrece un formalismo transparente y poderoso para el cálculo de energías monoeléctricas de enlace y los orbitales de Dyson correspondientes. Nuevos potenciales ópticos aproximados que describen los efectos de relajación de orbitales y de correlación electrónica ahora obtienen errores promedios de 0.1 eV con algoritmos que cuestan menos que la transformada de integrales bi-eletrónicas a la base canónica de orbitales Hartree-Fock. Investigaciones matemáticas recientes han revelado relaciones entre matrices reducidas de la densidad electrónica y las energías de enlace que facilitan la interpretación cualitativa de los resultados numéricos. Estas herramientas sirven para hacer asignaciones precisas de espectros fotoelectrónicos de aniones doble Rydberg y predicciones de nuevos miembros de esta clase exótica de aniones que lucen dos electrones difusos en el exterior de un catión estable.