

Tabla de Contenido

1. Introducción	1
1.1. Antecedentes generales	1
1.2. Objetivos	2
2. Marco Teórico	3
2.1. Métodos <i>ab initio</i>	3
2.1.1. La aproximación de Born-Oppenheimer	3
2.1.2. El método de Hartree-Fock	4
2.1.3. Correlación electrónica	7
2.1.4. Conjunto de bases	8
2.2. Teoría de la dispersión	9
2.2.1. Ecuación de canales acoplados y sección eficaz	9
2.2.2. Momento angular y expansión en ondas parciales	11
2.2.3. Resonancias	15
2.2.4. Colisión entre un rotor rígido y un átomo	18
2.2.5. Colisión entre dos rotores rígidos	19
3. Resultados	22
3.1. Colisión del C_3+H_2 como rotores rígidos	22
3.1.1. Cálculos <i>ab initio</i>	22
3.1.2. Ajuste a una superficie de energía potencial tetradimensional	23
3.1.3. Análisis de la superficie de energía potencial tetradimensional	24
3.1.4. Dinámica con la superficie de energía potencial tetradimensional	28
3.1.5. Ajuste a una superficie de energía potencial promediada bidimensional	29
3.1.6. Dinámica con la superficie de energía potencial bidimensional	31
3.2. Implicaciones del flexión del C_3 en la colisión con para- H_2	32
3.2.1. Cálculos <i>ab initio</i>	32
3.2.2. Superficie de energía potencial tetradimensional promediada sobre H_2 considerando flexión	33
3.2.2.1. Grilla promediada sobre H_2	33
3.2.2.2. Superficie de energía potencial tetradimensional considerando flexión	34
3.2.3. Influencia de la flexión sobre la dinámica	38
4. Conclusiones	41
Bibliografía	42