



Universidad Nacional Autónoma de México

FACULTAD DE CIENCIAS

ESTUDIO SOBRE LOS EFECTOS DE 3 CUERPOS
EN PEQUEÑOS CUMULOS DE PLATA

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TITULO DE

F I S I C O

P R E S E N T A

JOSE LUIS FLORES TORRES

ASESOR: DR. RUBEN SANTAMARIA ORTIZ



FACULTAD DE CIENCIAS
SECCION ESCOLAR

MEXICO, D.F. ENERO DE 1998

INDICE

Cap. 1. Introducción

1.1 Principales Objetivos del Capítulo	1
1.2 Transición de la Mecánica Clásica a la Mecánica Cuántica	1
1.3 Postulados de la Mecánica Cuántica	10
1.4 Principios	14
1.5 Cúmulos	16
1.6 Cúmulos de Plata	19
1.7 Referencias	20

Cap. 2. Metodología

2.1 Introducción	22
2.2 La Aproximación de Born-Oppenheimer	23
2.3 Matrices de Densidad Reducidas	28
2.4 Teoremas de Hohenberg y Kohn	34
2.5 El Método de Kohn y Sham	37
2.6 Ecuaciones de Kohn y Sham	41
2.7 La Aproximación de Densidad Local para la Energía de Intercambio	45
2.8 La Aproximación de Gradiente para la Energía de Intercambio	49
2.9 La Energía de Correlación	51
2.10 Energías de Intercambio y Correlación	57
2.11 Referencias	61

Cap. 3. Cuantificación de los Efectos de 2 y 3 Cuerpos por medio del Dímero y Trímero de Plata

3.1 Introducción	62
3.2 El Atomo y el Dímero de Plata	65
3.3 El Trímero de Plata	71
3.3.1 El Trímero en forma de Triángulo Equilátero	71
3.3.2 El Trímero en forma de Triángulo Isósceles	73
3.3.3 El Trímero en forma de Triángulo Escaleno	76
3.4 Referencias	83

Cap. 4. Efectos de Tamaño en Pequeños Cúmulos de Plata

4.1 Introducción	84
4.2 Efectos de Tamaño en Pequeños Cúmulos de Plata	85
4.3 Conformaciones más Estables del Tetrámero de Plata	92
4.4 Potencial Modelo para Cúmulos de Plata	97
4.5 Referencias	102

Conclusiones Generales 103

Apéndice A 106