

Conteúdo

| | |
|--|-----|
| I – INTRODUÇÃO | 1 |
| 1.1 SUPERFÍCIE DE ENERGIA POTENCIAL..... | 2 |
| 1.1.1 Conceito e sua importância..... | 2 |
| 1.1.2 Base de funções..... | 9 |
| 1.1.3. Sistema de Coordenadas..... | 12 |
| 1.2 SUMÁRIO..... | 22 |
| BIBLIOGRAFIA..... | 24 |
| | |
| II – CÁLCULO <i>AB INITIO</i> DA SUPERFÍCIE DE ENERGIA POTENCIAL | 25 |
| 2.1 MÉTODOS VARIACIONAIS..... | 26 |
| 2.1.1 Princípio variacional..... | 26 |
| 2.1.2 Aproximação Hartree-Fock..... | 27 |
| 2.1.3 Pós Hartree-Fock..... | 31 |
| 2.2 MÉTODOS PERTURBACIONAIS..... | 36 |
| 2.2.1 Teoria perturbacional de Rayleigh Schrödinger..... | 36 |
| 2.2.2 Teorias de perturbação de troca ou adaptada à simetria..... | 44 |
| 2.3 POTENCIAIS PAR-ADITIVOS E NÃO PAR-ADITIVOS; SEU PAPEL..... | 47 |
| 2.4 CONSISTÊNCIA E EXTENSIVIDADE EM TAMANHO..... | 50 |
| 2.5 QUADRO-RESUMO..... | 55 |
| BIBLIOGRAFIA..... | 56 |
| | |
| III – A EXPANSÃO DUPLA MULTICORPOS (DMBE) | 59 |
| 3.1 EXPANSÃO MBE..... | 60 |
| 3.2 MODELO EHFAC _n E MÉTODO DMBE..... | 63 |
| 3.3 SIGNIFICADO DOS TERMOS NO MÉTODO DMBE..... | 68 |
| 3.4 REPRESENTAÇÃO DOS POTENCIAIS A DOIS CORPOS..... | 70 |
| 3.5 REPRESENTAÇÃO DOS POTENCIAIS A TRÊS CORPOS..... | 73 |
| 3.6 DMBE SEC E A CORRECÇÃO EMPÍRICA DE DAVIDSON..... | 78 |
| 3.7 CONCLUSÃO..... | 80 |
| BIBLIOGRAFIA..... | 84 |
| | |
| IV – H₃ UM SISTEMA MUITO ESTUDADO | 87 |
| 4.1 INVESTIGAÇÃO NO SISTEMA TRIATÓMICO MAIS SIMPLES..... | 88 |
| 4.1.1 Breve perspectiva..... | 88 |
| 4.1.2 Estudos actuais em sistemas de Rydberg..... | 94 |
| 4.2 ESTUDOS NÃO PAR-ADITIVOS REALIZADOS EM H ₃ (⁴ A')..... | 97 |
| 4.3 ESCOLHA DA QUESTÃO A ESTUDAR..... | 103 |
| BIBLIOGRAFIA..... | 105 |
| | |
| V – SUPERFÍCIE DE ENERGIA POTENCIAL PARA O SISTEMA H₃ (⁴A') | 107 |
| 5.1 CÁLCULOS <i>AB INITIO</i> | 108 |
| 5.1.1 Escolha da base de funções..... | 108 |
| 5.1.2 Uso da simetria permutacional nuclear..... | 115 |
| 5.2 REPRESENTAÇÃO FUNCIONAL E AJUSTE..... | 125 |
| 5.3 RESULTADOS..... | 137 |
| 5.4 DISCUSSÃO..... | 147 |
| 5.4.1 Estudos no potencial HF..... | 147 |

| | |
|---|-----|
| 5.4.1.1 Comparação com outros resultados..... | 147 |
| 5.4.1.2 Variação de $V^{(3)} / V^{(2)}$ | 151 |
| 5.4.2 Análise do potencial total de interacção..... | 159 |
| 5.5 CONCLUSÃO..... | 161 |
| BIBLIOGRAFIA..... | 164 |

| | | |
|--------------|---|------|
| ANEXO | Compilação de trabalhos que expressamente mencionam | |
| | O sistema H_3 | A-I |
| | Bibliografia..... | A-VI |