

Principios de estructura de la materia. Tarea – 5

Leer antes los capítulos 6 y 7 del Gillespie y Popellier.

- 1- ¿Qué dice el teorema de Hellmann-Feynman?
- 2- ¿Qué es un campo escalar? Da 3 ejemplos.
- 3- ¿Qué es un campo vectorial gradiente? Da 1 ejemplo.
- 4- ¿A qué se le llama un punto extremo de una función?
- 5- ¿Cuántos tipos de puntos críticos pueden existir en 3 dimensiones?
- 6- ¿Cómo se denotan los puntos críticos de un campo escalar tridimensional?
- 7- ¿Qué es el laplaciano de la densidad electrónica?
- 8- ¿Qué es la función L ?
- 9- ¿Qué información útil se obtiene de la función L ?
- 10- ¿Cómo se define un átomo en la Teoría de Átomos en Moléculas (TAIM)?
- 11- ¿Se puede definir un enlace mediante TAIM? Explica.
- 12- ¿A qué se llama *gráfica molecular*? Da un ejemplo.
- 13- ¿Cómo se calculan las cargas atómicas en TAIM y qué ventajas tienen sobre otros análisis de población electrónica como el de Mulliken o Lowdin?
- 14- ¿Se pueden relacionar fácilmente los siguientes conceptos:
 - a) densidad en un punto crítico de enlace
 - b) elipticidad de una trayectoria de enlace
 - c) radio de enlace

con conceptos clásicos tales como:

- carácter covalente
- carácter iónico
- enlace doble
- enlace triple?

Desarrolla una reflexión al respecto.