

# Tarea 0

---

## Ejercicio 1.

- Determine la constante de normalización  $N_{1s}^{GTO}$  para el siguiente función GTO de el átomo de hidrógeno:

$$\Psi_{1s} = N_{1s}^{GTO} \exp(-\alpha r^2)$$

- Obtenga una expresión para la energía electrónica del estado fundamental del hidrógeno, utilizando la función GTO.
- Encuentre el mejor valor para el exponente  $\alpha$  para obtener la energía electrónica más baja y determine la energía. Como se compara su resultado con el experimental?

## Ejercicio 2.

### Análisis de geometría molecular

Escriba un programa en Python para calcular, distancias de enlace, ángulos de enlace, ángulos diedros y ángulos fuera del plano para la molécula de acetaldehído. También calcule los momentos de inercia y las constantes rotacionales de la misma molécula. Vea el documento tarea0\_ref.pdf para instrucciones detalladas. Utilice el modulo Python de psi4 para verificar sus resultados.