



PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATOLICA DE CHILE
ESCUELA DE INGENIERÍA
Dirección de Investigación e Innovación
Programa IPre de Investigación en Pregrado

Análisis Vibracional y Rotacional del Hidrógeno Diatómico

Ian Gross Sánchez

Departamento de Ingeniería Mecánica y

Metalúrgica

Facultad de Ingeniería

Universidad Católica

Alumno de sexto año

igross1@uc.cl

Jorge Ramos Grez

Departamento de Ingeniería Mecánica y

Metalúrgica

Facultad de Ingeniería

Pontificia Universidad Católica de Chile

Profesor Titular

jramos@uc.cl

Resumen

El presente trabajo tiene por objetivo estudiar los **ESTADOS ENERGÉTICOS** de la molécula de hidrógeno, proponiendo un modelo computacional que permita describir sus parámetros de enlace. Para ello se utilizan simulaciones de **MECÁNICA CUÁNTICA** mediante el software ORCA (Neese, 2022), utilizando el método de Teoría del Funcional de la Densidad, DFT en adelante. Debido a que DFT entrega resultados confiables solo cerca del mínimo energético, se utiliza la información obtenida de la simulación para ajustar una curva de Morse, la cual permite extrapolar el comportamiento anarmónico del **ENLACE MOLECULAR**.

El proceso experimental vibracional se divide en tres etapas: calibración de energías atómicas y moleculares, escaneo radial de la energía, y ajuste de la curva de Morse. Los estados rotacionales se calculan directo de la fórmula de rotor cuántico rígido. Los resultados se contrastan con valores experimentales obtenidos de la literatura y con los obtenidos por el paquete *Freq* de ORCA que tiene una implementación notablemente más sencilla.

Los resultados muestran que la curva de Morse reproduce con buena precisión los parámetros de vibración y **ANARMONICIDAD** del enlace, con un error relativo de 0.3% en la **FRECUENCIA VIBRACIONAL**, 5% en la anarmonicidad y 2% en la **CONSTANTE ROTACIONAL**. Por otro lado, el método *Freq* obtiene un error relativo de 0.5% en la frecuencia vibracional y 0.8% en la constante rotacional.



PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATOLICA DE CHILE
ESCUELA DE INGENIERÍA
Dirección de Investigación e Innovación
Programa IPre de Investigación en Pregrado

Se concluye que el ajuste de potenciales mediante DFT y Morse es útil y preciso para moléculas simples, y que el paquete de frecuencias de ORCA ofrece una alternativa sencilla para pequeñas perturbaciones en sistemas más complejos.

Palabras clave: energía vibracional, potencial de Morse, hidrógeno molecular, ORCA.

1. Introducción

Comprender el comportamiento mecánico de los enlaces atómicos es fundamental para predecir la respuesta de los materiales frente a esfuerzos externos. Propiedades ampliamente utilizadas en mecánica de materiales, como el módulo de elasticidad, la tenacidad o el punto de fractura dependen directamente del **PERFIL DE TRACCIÓN Y COMPRESIÓN** a nivel atómico. Estos perfiles representan la relación entre la fuerza y la **DEFORMACIÓN** que experimentan los enlaces al estirarse o comprimirse, y determinan la energía necesaria para deformar o romper un sistema molecular. El estado del arte contiene soluciones para casos específicos, como la tesis de magister de Seuret (2020), que trata con estructuras de carbono.

El presente trabajo toma como base la molécula de hidrógeno por simplicidad. Mediante simulaciones cuánticas realizadas en el software ORCA, se obtiene el perfil energético de enlace como función de la distancia interatómica, y se ajusta un modelo de Morse a partir de los datos obtenidos. A través de este procedimiento, se determinan los parámetros vibracionales y rotacionales del sistema. Estos resultados son comparados con el método de frecuencias proporcionado por ORCA y los resultados de la literatura.

2. Construcción del Experimento

2.1 Marco Teórico

El siguiente trabajo tiene por objetivo obtener propiedades espectroscópicas de una molécula que se relacionan a sus propiedades mecánicas, en específico, se busca obtener las energías vibracionales y rotacionales. Para esto, se utiliza la teoría de funcionales de densidad, DFT por sus siglas en inglés, que permite medir energía como función del radio.



PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATOLICA DE CHILE
ESCUELA DE INGENIERÍA
Dirección de Investigación e Innovación
Programa IPre de Investigación en Pregrado

2.1.1 Método de Hartree-Fock y DFT

El método de Hartree-Fock, HF en adelante, permite describir sistemas electrónicos en función de la densidad electrónica utilizando campos auto consistentes (Libretexts, 2023a). Este método utiliza la interpretación cuántica original propuesta por Schrödinger, donde el electrón está distribuido a través de la nube electrónica. Aunque esta interpretación ha sido abandonada en la física teórica por su incompatibilidad con el modelo estándar, sigue siendo relevante en el campo de la química cuántica.

El modelo HF tiene un problema fundamental: no es capaz de modelar correctamente la interacción de los electrones, esto debido a que no cuenta con un funcional de correlación (Sharma, 2022). Este es el principal cambio que incorpora DFT a su método de solución. Al trabajar con el átomo de hidrógeno, el cual posee un solo electrón, ambos métodos son equivalentes; sin embargo, dependiendo del tipo de molécula con el que se está trabajando, existen muchos métodos derivados de HF y de DFT que pueden resultar útiles. Es importante tener en cuenta que no existe un único funcional de correlación, por lo que cada experimento debe ser calibrado para elegir el funcional que entregue mejores resultados.

2.1.2 Anarmonicidad y Potencial de Morse

El enlace molecular no es simétrico, pues al acercar los átomos, las fuerzas electrónicas se vuelven más intensas; al estirarlas, se vuelven más débiles. De este modo, se obtiene un perfil de energía distinto para la compresión y la tracción. A este tipo de potencial se le denomina anarmónico.

De acuerdo con Libretexts (2025), el potencial de Morse es un método empírico que permite medir la anarmonicidad del enlace atómico. Cuenta con tres parámetros, la profundidad del pozo potencial, D_e , en unidades de energía; el radio de equilibrio, r_0 , en unidades de longitud; y el ancho del pozo, a , en unidades inversas de metro. De este modo se tiene:

$$E_B(r) = D_e(1 - e^{-a(r-r_0)})^2 \quad (1)$$

Así, se obtiene la energía de enlace en unidades de energía. Lo que nos permite extender el operador de DFT a toda la región del enlace.

Luego, el potencial de Morse se puede relacionar con los parámetros del oscilador anarmónico cuántico de segundo orden, es decir, la frecuencia de oscilación, ω_e , en unidades inversas de distancia; y la



PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATOLICA DE CHILE
ESCUELA DE INGENIERÍA
Dirección de Investigación e Innovación
Programa IPre de Investigación en Pregrado

anarmonicidad, χ_e , en unidades adimensionales. Se utilizan las ecuaciones proporcionadas por Libretexts (2025), como se ven a continuación:

$$D_e = \frac{\omega_e}{4\chi_e} \quad (2)$$

$$\omega_e = a \sqrt{\frac{\hbar D_e}{\pi c \mu}} \quad (3)$$

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_e - \left(n + \frac{1}{2}\right)^2 \hbar \omega_e \chi_e \quad (4)$$

Donde \hbar constante reducida de Planck, c la velocidad de la luz, μ la masa reducida del sistema, y E_n la energía del n -ésimo estado ligado.

2.2 Experimento de Estados Vibracionales

En la siguiente subsección se detallan los pasos para obtener los estados vibracionales para una molécula de hidrógeno diatómico. Si bien se trabaja con funciones continuas, se debe restringir el recorrido de la función a los estados permitidos cuánticamente.

2.2.1 Control del Error

Para la realización de este experimento, se deben realizar dos pasos de calibración previos, la calibración de la energía atómica, y la calibración de la energía y geometría molecular.

2.2.1.1 Control del Error Atómico

Se debe obtener la energía del estado base de los átomos singulares, en este caso ambos son hidrógenos. Dado que el hidrógeno tiene un solo electrón, el método de DFT se reduce al caso de HF, como fue discutido en el apartado 2.1.1. Además, el átomo de hidrógeno cuenta con una solución analítica, $E_H = 13.6 \text{ eV}$ (Libretexts, 2021) con la que contrastar los resultados experimentales. Para esto, se realizan iteraciones con distintas bases de funciones ortogonales utilizando el Código 1 presentado abajo.



```
! HF [Base] TightSCF
```

```
* xyz 0 2
```

```
H 0.0 0.0 0.0
```

```
*
```

Código 1: Calibración de la energía del estado basal del átomo de hidrógeno. Elaboración Propia

Donde se reemplazan las bases de funciones disponibles para ORCA (*Basis Sets*, s. f.) en el espacio marcado por los corchetes cuadrados. Los resultados más exactos se obtienen utilizando la base 'aug-cc-pVTZ', que entrega los siguientes resultados:

$$E_{H,Orca} = -13.587 \text{ eV}$$

Con un margen de error de:

$$\left| \frac{E_{H,Orca}}{E_H} - 1 \right| = 0.1\%$$

Cabe recalcar que el estudio de moléculas más complejas requiere utilizar un funcional de intercambio y correlación. Además, no existen resultados teóricos para átomos pesados, por lo que se debe contrastar con resultados experimentales y de espectroscopía.

2.2.1.2 Control del Error Molecular

Se debe obtener la energía y geometría de equilibrio de la molécula para configurar el rango de experimentación. Cabe recalcar que, para alcanzar el criterio de convergencia, es muy importante entregar una configuración inicial cercana al punto de equilibrio. Configuraciones iniciales mal diseñadas pueden tardar más tiempo en converger, entregar sistemas disociados o mal asociados, es decir, los enlaces entre átomos no son los que deberían ser. Este paso previo de optimización se vuelve relevante al tratar con moléculas más grandes, donde el diseño matricial se vuelve incrementalmente complejo de realizar. Este problema puede ser solventado mediante el uso de Avogadro, que permite diseñar la molécula de modo gráfico y realizar una primera optimización geométrica. Por ejemplo, en el caso del etileno, la optimización inicial otorga resultados con tres cifras significativas de exactitud en sus largos y ángulos de enlace al comparar con los resultados de (*Experimental data for C2H4 (Ethylene)*, 2022):



PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATOLICA DE CHILE
ESCUELA DE INGENIERÍA
Dirección de Investigación e Innovación
Programa IPre de Investigación en Pregrado

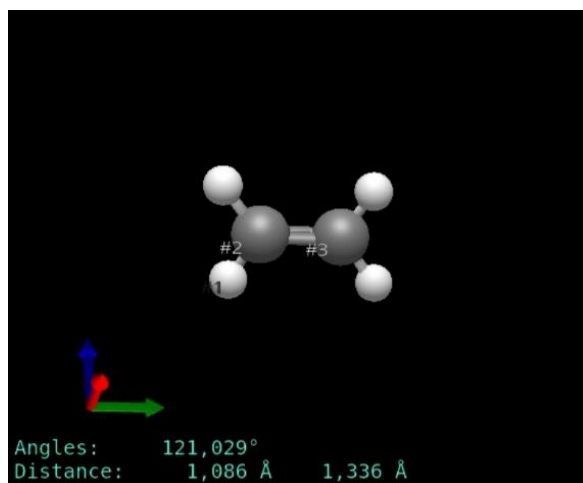


Figura 1: Captura de pantalla de molécula de etileno diseñada con Avogadro. El programa se encuentra en inglés. Las dos líneas de texto muestran “ángulo” y “distancia” relativos a los números asignados a cada átomo.

Como se puede ver arriba, las distancias están expresadas en unidades de Ångstrom, así como las energías se reportan en Electronvolts o Hartrees, este es el sistema de medidas en las que funcionan la gran mayoría de los softwares de computación cuántica. La geometría obtenida utilizando Avogadro se puede exportar en formato .xyz para ser introducida en el bloque de código ORCA correspondiente también en Ångstroms. Por el momento no es necesario utilizar este procedimiento, pues como la molécula de hidrógeno es diatómica, el problema se reduce a la distancia radial entre ambas moléculas. La optimización geométrica se obtiene del Código 2 a continuación.

```
! VeryTightOPT [Base] [Funcional]
* xyz 0 1
H 0 0 0
H [r0] 0 0
*
```

Código 2: Calibración del punto de equilibrio de la molécula. Elaboración Propia

En este caso, además de la base de funciones, se necesita indicar un funcional de intercambio y correlación (*DFT Calculations*, s. f.) en el espacio marcado por los corchetes cuadrados. Para asegurar



PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATOLICA DE CHILE
ESCUELA DE INGENIERÍA
Dirección de Investigación e Innovación
Programa IPre de Investigación en Pregrado

una convergencia rápida, se utiliza una solución inicial de $r_0 = 0.741 \text{ \AA} = 7.41 \times 10^{-11} \text{ m}$ para la separación radial de los átomos. Los resultados más exactos se obtienen utilizando el funcional 'B3LYP', sin embargo, se debe reducir la base de 'cc-pV5Z' a 'cc-pVQZ' para evitar errores de convergencia. Los resultados obtenidos se presentan a continuación:

$$E_{H_2}^{Orca} = -31.948 \text{ eV} = -5.1186 \times 10^{-18} \text{ J}$$

$$r_{eq,H_2}^{Orca} = 0.74166 \text{ \AA} = 7.4166 \times 10^{-11} \text{ m}$$

La energía del enlace resulta de restar la energía de cada átomo a la energía de la molécula, es decir,

$$E_{B,H_2}^{Orca} = E_{H_2}^{Orca} - 2 \times E_H^{Orca} = 4.774 \text{ eV} = 7.649 \times 10^{-19} \text{ J}$$

Además, sirven como valor de referencia para comparar con la literatura, $E_{b,H_2} = 4.52 \text{ eV}$ (*Hydrogen Molecule*, s. f.) y $r_{H_2} = 0.7414 \text{ \AA} = 7.414 \times 10^{-11} \text{ m}$ (*Experimental Data For H2 (Hydrogen Diatomic)*, 2022). Podemos calcular márgenes de error para cada uno en este punto:

$$\left| \frac{E_{B,H_2}^{Orca}(r_0)}{E_{B,H_2}(r_0)} - 1 \right| = 6\% \quad ; \quad \left| \frac{r_{eq,H_2}^{Orca}}{r_{eq,H_2}} - 1 \right| = 0.03\%$$

Con este paso, termina la fase de calibración y se avanza sobre conseguir los estados energéticos de la molécula.

2.2.2 Muestreo

En primer lugar, para el cálculo de los estados vibracionales se debe realizar un escaneo de geometría radial. Utilizando el Código 2, se toman $n = 50$ mediciones de energía en el intervalo radial $[0.4, 2.3] \text{ \AA} = [0.4, 2.3] \times 10^{-10} \text{ m}$.¹ Estos datos se pueden observar en la Figura 1 abajo.

¹ De momento, el intervalo adecuado se determina para incluir por lo menos un valor de energía positiva en cada extremo. Asegura una buena medida del perfil de tracción, pero no necesariamente el de compresión.



PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATOLICA DE CHILE
ESCUELA DE INGENIERÍA
Dirección de Investigación e Innovación
Programa IPre de Investigación en Pregrado

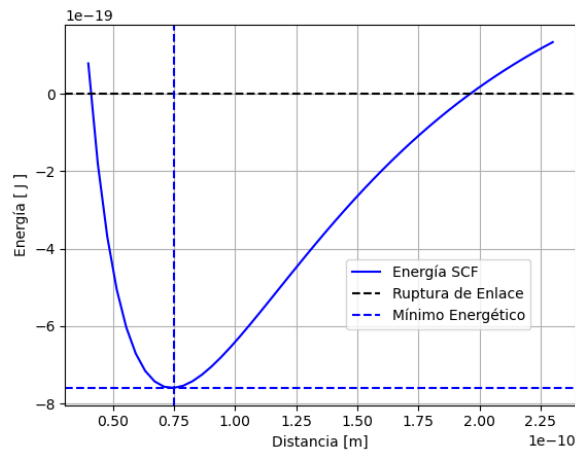


Figura 1: Energía de enlace en H2. Elaboración propia

Como se puede notar en el gráfico, al separar los átomos de hidrógeno, llega un punto en el que existe una energía positiva. Este resultado no tiene sentido físico, pues implica que las partículas a largo alcance se repelen. Sin embargo, se pueden tomar los datos de la simulación para construir la función de Morse como se ve en la Figura 2 a continuación.

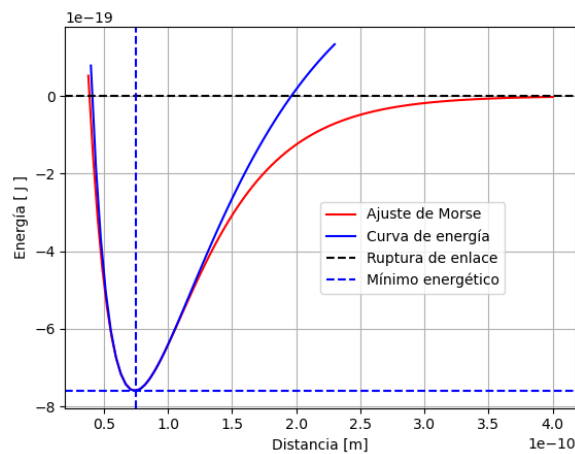


Figura 2: Ajuste de potencial de Morse para H2. Elaboración propia

La curva de Morse arriba se encuentra utilizando la Ecuación 1, donde la profundidad del pozo potencial, $D_e = E_{B,H_2}^{Orca}$, se encuentra el mínimo energético; el radio de equilibrio, $r_{eq} = r_{eq,H_2}^{Orca}$, en el



PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATOLICA DE CHILE
ESCUELA DE INGENIERÍA
Dirección de Investigación e Innovación
Programa IPre de Investigación en Pregrado

radio que alcanza el mínimo energético; y la determinación del parámetro inverso, $a = 1.95 \times 10^{10} \text{ m}$, se realiza de forma iterativa con ajuste manual, asegurando que la curva de Morse acote la curva de energía por abajo.

2.3 Cálculo de Estados Rotacionales

A diferencia de los estados vibracionales, los estados rotacionales son más directos de calcular, pues existe una forma analítica directa de realizar el cálculo. Para esto, se debe obtener la constante rotacional dada por Libretexts (2023b):

$$B_e = \frac{h}{8\pi^2 c \mu r_0^2} \quad (5)$$

Y entonces los estados de energía rotacional se calculan como:

$$E_R = B_e h c (J + 1) J \quad (6)$$

Donde h es la constante de Planck y el resultado completo se encuentra dividido por un factor hc para obtener resultados comparables con la literatura.

3. Resultados y discusión

3.1 Estados Vibracionales

Una vez obtenida la curva de Morse, es posible utilizar sus parámetros para calcular los parámetros de anarmonicidad de segundo orden utilizando las Ecuación 2 y Ecuación 3, con lo cual se obtiene:

$$\begin{aligned} \omega_{e,H_2}^{Morse} &= 4411.19 \text{ cm}^{-1} = 441119 \text{ m}^{-1} \\ \omega_{e,H_2}^{Morse} \chi_{e,H_2}^{Morse} &= 127.17 \text{ cm}^{-1} = 12717 \text{ m}^{-1} \end{aligned}$$

Que se pueden contrastar con los valores de la literatura (*Experimental Data For H2 (Hydrogen Diatomic)*, 2022):

$$\begin{aligned} \omega_{e,H_2} &= 4401.213 \text{ cm}^{-1} = 440121.3 \text{ m}^{-1} \\ \omega_{e,H_2} \chi_{e,H_2} &= 121.336 \text{ cm}^{-1} = 12133.6 \text{ m}^{-1} \end{aligned}$$

Con lo que se obtiene márgenes de error de:

$$\left| \frac{\omega_{e,H_2}^{Morse}}{\omega_{e,H_2}} - 1 \right| = 0.3\% \quad ; \quad \left| \frac{\omega_{e,H_2}^{Morse} \chi_{e,H_2}^{Morse}}{\omega_{e,H_2} \chi_{e,H_2}} - 1 \right| = 5\%$$

Utilizando la Ecuación 4 para graficar los estados vibracionales con respecto a la curva de Morse, podemos observar la naturaleza discreta que posee el fenómeno de deformación de un enlace como se muestra en la Figura 3 abajo.

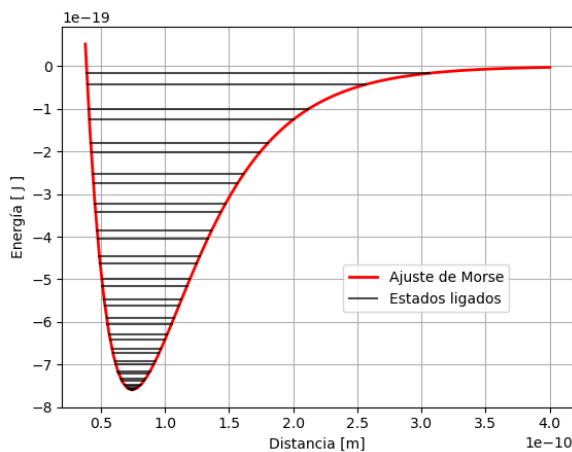


Figura 3: Estados vibracionales de H2. Elaboración propia

En el gráfico arriba, solo las intersecciones entre la curva de Morse y los estados vibracionales son posiciones viables para el sistema. Los saltos se dan de forma discreta entre un nivel y el otro, sin pasar por los puntos intermedios.

3.2 Estados Rotacionales

Utilizando la Ecuación 5, se calcula la constante rotacional para obtener:

$$B_{e,H_2}^{Orca} = 59.61 \text{ cm}^{-1} = 5961.6 \text{ m}^{-1}$$

Que se puede comparar con los valores obtenidos de la literatura (*Experimental Data For H2 (Hydrogen Diatomic)*, 2022):

$$B_{e,H_2} = 60.853 \text{ cm}^{-1} = 6085.3 \text{ m}^{-1}$$

Con lo que se obtiene un error de:

$$\left| \frac{B_{e,H_2}^{Orca}}{B_{e,H_2}} - 1 \right| = 2\%$$

3.3 Método de Frecuencias de ORCA

Es posible notar que el método para el cálculo de las energías vibracionales puede ser un poco engorroso, siendo que la molécula tiene un solo estado vibracional. A medida que las moléculas crecen en cantidad de átomos, este método se vuelve poco práctico, sin embargo, ORCA ofrece un



PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATOLICA DE CHILE
ESCUELA DE INGENIERÍA
Dirección de Investigación e Innovación
Programa IPre de Investigación en Pregrado

paquete de cálculo de frecuencias llamado *Freq* que realiza un análisis termoquímico completo de la molécula, entre ellos, calcula los estados ligados de la molécula, incluyendo estados vibracionales, electrónicos y rotacionales para el estado de reposo. Se puede implementar este método a través del código 3:

```
! B3LYP cc-pVQZ Freq

* xyz 0 1
H 0.000000 0.000000 0.000000
H 0.744211807942 0.000000 0.000000
*
```

Código 3: Método de cálculo de frecuencias de ORCA. Elaboración propia.

Para utilizar el paquete de frecuencias es necesario utilizar las coordenadas convergidas de la optimización geométrica. Se mantiene la misma base que se utilizó para el escaneo de geometría. Si bien esta combinación de base y funcional puede no ser óptima, sirve de punto de referencia para comparar con los datos obtenidos por el método anterior. Los resultados obtenidos se presentan a continuación:

$$\omega_e^{Freq} = 4381.03 \text{ cm}^{-1} = 438103 \text{ m}^{-1}$$
$$B_e^{Freq} = 60.391 \text{ cm}^{-1} = 6039.1 \text{ m}^{-1}$$

Con márgenes de error de:

$$\left| \frac{\omega_{e,H_2}^{Freq}}{\omega_{e,H_2}} - 1 \right| = 0.5\% \quad ; \quad \left| \frac{B_{e,H_2}^{Freq}}{B_{e,H_2}} - 1 \right| = 0.8\%$$

Como se puede ver, los cálculos de frecuencia no incluyen el término χ_e , pues el cálculo se realiza con un potencial armónico, sin las correcciones anarmónicas obtenidas mediante el método de Morse. A la vez, la pérdida de exactitud obtenida es poca, incluso sin optimizar para la mejor combinación de base y funcional. Por otro lado, el cálculo de la constante rotacional tiene un error menor al obtenido por el método analítico presentado en la subsección 3.2.

Estos valores pueden ser utilizados como parámetros de resistencia a la deformación mediante fuerzas de los enlaces individuales que componen una molécula. En específico, la frecuencia vibracional está



PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATOLICA DE CHILE
ESCUELA DE INGENIERÍA
Dirección de Investigación e Innovación
Programa IPre de Investigación en Pregrado

relacionada a la constante de fuerza, mientras la constante rotacional se puede relacionar al trabajo requerido para girar un enlace en el sistema restringido de una molécula. En este escenario, la solución mediante el método de Morse permite considerar mejor el comportamiento lejos del punto de equilibrio, mientras el paquete de frecuencias incorpora frecuencias de deformación angular y diedral con buena precisión en la vecindad del estado de reposo.

4. Conclusiones

El presente trabajo establece y contrasta dos metodologías computacionales para encontrar parámetros de enlace para una molécula de hidrógeno diatómico. A través del ajuste del potencial de Morse sobre datos obtenidos por DFT, fue posible calcular con buena precisión los parámetros vibracionales y rotacionales del sistema.

Por otro lado, si bien el método de frecuencias del paquete *Freq* entrega resultados cercanos a los esperados y representa una alternativa computacionalmente eficiente, su validez se restringe al entorno del punto de equilibrio. Esto plantea dudas sobre su aplicabilidad para describir correctamente el comportamiento energético en todo el rango de deformaciones, especialmente en zonas donde el enlace se encuentra notablemente comprimido o estirado. Si se requiere un análisis detallado del régimen anarmónico completo, existen paquetes de cálculo de frecuencias anarmónicas más avanzados, pero estos quedan fuera del alcance del presente trabajo.

Se observa que la frecuencia vibracional se relaciona directamente con la constante de fuerza del enlace y la rotacional con el trabajo de giro de una molécula. Conociendo el valor de estas dos resistencias, ya sea en función del radio o para un radio de equilibrio, se abre la posibilidad de modelar perfiles de deformación bajo esfuerzos de tracción o compresión para cada enlace. La propuesta que deja abierta este trabajo es la de relacionar el perfil de deformación global de una molécula a partir de los perfiles individuales de sus enlaces componentes.



PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATOLICA DE CHILE
ESCUELA DE INGENIERÍA
Dirección de Investigación e Innovación
Programa IPre de Investigación en Pregrado

Agradecimientos

Este trabajo no habría sido posible sin el generoso apoyo de Jimmy Muñoz, quien dedicó incontables horas para discutir y formular los fundamentos del problema físico, acompañándome a lo largo de todo el proceso de investigación. La idea original surgió durante el tiempo que compartí en el laboratorio de catálisis junto a Daniela Silva, por recomendación de Magdalena Walczak. Los fundamentos de la cuántica computacional los adquirí gracias al curso de Química Computacional, impartido por Raiza Hernández y Vladimiro Mujica, quienes me permitieron participar como oyente por recomendación de mi profesor guía, Jorge Ramos.

Glosario

- **ANARMONICIDAD:** Comportamiento asimétrico de un enlace atómico cuando se deforma por tracción o compresión.
- **DEFORMACIÓN:** Cambio en la geometría de una molécula debido a la aplicación de una fuerza externa, ya sea por tracción (alargamiento) o compresión (acortamiento) del enlace.
- **CONSTANTE ROTACIONAL:** Energía asociada al movimiento de rotación de una molécula en torno a su centro de masa. Se mide con respecto a la radiación absorbida en el fenómeno de rotación. Su uso es estándar en espectroscopia.
- **ENLACE MOLECULAR:** Unión entre dos átomos dentro de una molécula, determinada por la interacción de sus electrones, y caracterizada por parámetros como la energía de enlace y la distancia de equilibrio.
- **ESTADOS ENERGÉTICOS:** Niveles de energía discretos que puede adoptar una molécula o átomo según las reglas de la mecánica cuántica.
- **FRECUENCIA VIBRACIONAL:** Magnitud relacionada a la energía de vibración. Se mide con respecto a la radiación absorbida en el fenómeno de vibración. Su uso es estándar en espectroscopia.
- **MECÁNICA CUÁNTICA:** Rama de la física que describe el comportamiento de partículas a escalas atómicas y subatómicas, base teórica de métodos como HF y DFT.
- **PERFILES DE TRACCIÓN Y COMPRESIÓN:** Funciones que describen cómo cambia la rigidez de un objeto al ser deformado. Estos perfiles permiten entender el comportamiento mecánico



PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATOLICA DE CHILE
ESCUELA DE INGENIERÍA
Dirección de Investigación e Innovación
Programa IPre de Investigación en Pregrado

del objeto a medida que se deforma. La tracción ocurre cuando la fuerza alarga los enlaces, la compresión cuando la fuerza acorta los enlaces

Referencias

Basis sets. (s. f.). ORCA Input Library. <https://sites.google.com/site/orcainputlibrary/basis-sets>

DFT calculations. (s. f.). ORCA Input Library. <https://sites.google.com/site/orcainputlibrary/dft-calculations>

Experimental data for C₂H₄ (Ethylene). (mayo de 2022). NIST.

<https://cccbdb.nist.gov/exp2x.asp?casno=74851&charge=0>

Experimental data for H₂ (Hydrogen diatomic). (mayo de 2022). NIST.

<https://cccbdb.nist.gov/exp2x.asp?casno=1333740>

Hydrogen molecule. (s. f.). Hyperphysics. <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/molecule/hmol.html>

Libretexts. (8 de diciembre de 2021). *13.6: the hydrogen atom.* Physics LibreTexts.

[https://phys.libretexts.org/Bookshelves/Quantum_Mechanics/Advanced_Quantum_Mechanics_\(Kok\)/13%3A_The_Schrodinger_Equation/13.6%3A_The_Hydrogen_Atom](https://phys.libretexts.org/Bookshelves/Quantum_Mechanics/Advanced_Quantum_Mechanics_(Kok)/13%3A_The_Schrodinger_Equation/13.6%3A_The_Hydrogen_Atom)

Libretexts. (30 de junio de 2023a). *8.3: Hartree-Fock Equations are Solved by the Self-Consistent Field Method.* Chemistry LibreTexts.

https://chem.libretexts.org/Courses/Pacific_Union_College/Quantum_Chemistry/08%3A_Multielectron_Atoms/8.03%3A_Hartree-Fock_Equations_are_Solved_by_the_Self-Consistent_Field_Method

Libretexts. (30 de junio de 2023b). *13.2: Rotations accompany vibrational transitions.* Chemistry LibreTexts.

https://chem.libretexts.org/Courses/Pacific_Union_College/Quantum_Chemistry/13%3A_Molecular_Spectroscopy/13.02%3A_Rotations_Accompany_Vibrational_Transitions

Libretexts. (15 de enero de 2025). *5.3: potential energy curves.* Chemistry LibreTexts.

https://chem.libretexts.org/Courses/Duke_University/CHEM_310L%3A_Physical_Chemistry_I_Laboratory/CHEM310L_-_Physical_Chemistry_I_Lab_Manual/05%3A_Molecular_Spectroscopy_of_Iodine/5.03%3A_Potential_Energy_Curves



PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATOLICA DE CHILE
ESCUELA DE INGENIERÍA
Dirección de Investigación e Innovación
Programa IPre de Investigación en Pregrado

Neese, F. (2022). Software update: The ORCA program system—Version 5.0. *Wiley Interdisciplinary Reviews Computational Molecular Science*, 12(5). <https://doi.org/10.1002/wcms.1606>

Seuret, H. (2020). *Cálculo de Propiedades Mecánicas y de Fractura de Sistemas de Carbono* [Tesis de maestría, universidad autónoma del estado de morelos].
<https://riaa.uaem.mx/xmlui/bitstream/handle/20.500.12055/1620/SEHHRLO3T.pdf?sequence=1&isAllowed=y>

Sharma, M. (3 de diciembre de 2022). *What is the difference between DFT and Hartree-Fock method?* BragitOff.com. <https://www.bragitoff.com/2022/12/what-is-the-difference-between-dft-and-hartree-fock-method/>