

ÍNDICE

	Página
A los Lectores	iii
CAPÍTULO 1. TEORÍA DE LAS FUERZAS INTERMOLECULARES	1
1.1 Introducción	1
1.2 Cálculos <i>ab initio</i>	5
1.3 Fuerzas de Corto Alcance	6
Método de Orbitales Moleculares	7
Método de Enlaces de Valencia	12
Modelo de Thomas-Fermi	16
1.4 Fuerzas de Largo Alcance	17
Electrostáticas	17
Inducción	23
Dispersión	25
Magnitudes Relativas de las Distintas Contribuciones	28
CAPÍTULO 2. POTENCIALES INTERMOLECULARES	29
2.1 Uso de Modelos	29
2.2 Modelos Cualitativos	29
Esferas Rígidas	30
Centros Puntuales de Repulsión (Esferas Blandas)	30
Potencial del Foso Rectangular	31
Potencial del Foso Triangular	31
Potencial de Sutherland	31
Modelo del Foso Trapezoidal	32
Foso Rectangular + Sutherland	33
Potencial Birrecíproco	33
Cuerpos Rígidos no Esféricos	34
2.3 Modelos con un Campo Central de Fuerzas	35
Potencial de Lennard-Jones ($n-6$)	36
Potencial exp-6	37
Potencial exp-6-8	39
Potencial de Carrá-Konowalow	39
Potencial 12-6-4	40
Potencial de Morse	40
Potencial de Rydberg	41
Potencial de Singer	41
Potencial de Guggenheim-McGlashan	41
Potenciales Generalizados	42

2.4 Modelos con un Campo de Fuerzas que Depende de la Orientación	43
Cuerpos Rígidos + Orientación	43
Potencial Central + Orientación	43
2.5 Modelos de Fuerza Pseudocentrales	44
Potencial de Cuatro Centros	44
Potenciales Cuasiesféricos.....	45
Potencial de Kihara	46
CAPÍTULO 3. DETERMINACIÓN EXPERIMENTAL DE FUERZAS INTERMOLECULARES	53
3.1 Métodos Espectroscópicos.....	53
Espectros de Vibración-Rotación	53
Ensanchamiento de las Bandas por la Presión ...	54
Predisociación.....	55
Resonancia Magnética Nuclear (rmn)	57
3.2 Haces Moleculares	57
3.3 Propiedades Macroscópicas.....	61
Segundo Coeficiente del Virial	61
Coeficiente de Joule-Thomson	62
Propiedades de Transporte	62
Propiedades Cristalinas.....	63
Factor de Separación Isotópica	65
Bibliografía	67