



## LOS ORBITALES DE DYSON Y LA ESTRUCTURA ELECTRÓNICA DE ANIONES EXÓTICOS

José Vicente Ortiz Bryant<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Universidad de Auburn; EE. UU.

e-mail: ortiz@auburn.edu

Los métodos *ab initio* de la teoría del propagador del electrón tienen ventajas computacionales y conceptuales con respecto a otras teorías que se basan en densidades o funciones de onda electrónicas en la interpretación de experimentos que caracterizan la estructura electrónica de aniones moleculares. En esta teoría la ecuación de Dyson incluye operadores monoelectrónicos no locales y dependientes de la energía. Los valores propios (eigenvalores) de este operador son iguales a energías de ionización o electroafinidades y las funciones propias (eigenfunciones) son los orbitales de Dyson. Con esta herramienta se puede predecir superhalógenos sin iones haluros, espectros fotoelectrónicos de cúmulos tridimensionales y bidimensionales de boro, e iones negativos que no existieran sin efectos fuertes de correlación electrónica, por ejemplo aniones difusos de fullerenos y aniones doble Rydberg que tienen dos electrones en orbitales difusos.