

Bibliografía

- [1] Editores de la Revista Scientific American; *The next 20 years of microchips*, Scientific American, Enero (2010).
- [2] Alca Quispe Fernando; *Estructura y Síntesis de Nanotubos de Carbono*. Elaboración y diseño en formato PDF por la Oficina General del Sistema de Bibliotecas y Biblioteca Central de la UNMSM (2006)
- [3] D. Tománek; *Science and Application of Nanotubes*, Springer, USA, 2002
- [4] Ed. Yoke Khin Yap; *B-C-N Nanotubes and Related Nanostructure. Lectures Notes in Nanoscale Science and Technology*, Vol. 6, Springer, USA, 2009
- [5] Min Zhang, Zhong-Min Su, Li-Kai Yan, Yong-Qing Qiu, Guan-Hua Chen b, Rong-Shun Wang *Theoretical interpretation of different nanotube morphologies among Group III (B, Al, Ga) nitrides* Chemical Physics Letters 408 145–149, 2005
- [6] et.al, A.G.; *The rise of graphene* Nature Material 6, 183-191 (2007).
- [7] A.F. Jalbout, R. del Castillo, L. Adamowicz; *Hydration of excess electrons trapped in charge pockets on molecular surfaces* Chem. Phys. Lett. 445 p. 89, 2007.
- [8] M. Pavanello, A.F. Jalbout, B. Trzaskowski, L. Adamowicz; *Fullerene as an Electron Buffer: Charge Transfer in Li@C60* Chem. Phys. Lett. 442 p. 339, 2007.
- [9] A. de Leon, A.F. Jalbout, Chem. Phys. Lett. 457 (2007), p. 179.
- [10] C.C. Chancey y M.C.M O'Brien; *The Jahn-Teller effect in C₆₀ and other icosahedral complexes*, Princeton University Press, New Jersey, 1997
- [11] H.Bruus y K. Flensberg; *Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics*, Oxford University Press, Oxford, 2004
- [12] Bersuker, Isaac B; *The Jahn-Teller effect*, Cambridge University Press, Cambridge 2006
- [13] cabierta.uchile.cl/revista/19/articulos/pdf/edu8.pdf (Noviembre-Diciembre, 2009)
- [14] <http://www.phys.uit.no/inge/ttp5/concept-of-pes.htm> (Noviembre-Diciembre, 2009)
- [15] <http://www.chem.wayne.edu/hbs/chm6440/PES.html>, Figura obtenida de 'Geometry Optimization artículo en Encyclopedia of Computational Chemistry (Noviembre-Diciembre, 2009)



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

- [16] Attila Szabo y Neil S. Ostlund; *Modern Quantum Chemistry, Introduction to Advanced Electronic Structure Theory*, Dover Publications INC, Mineola NY, 1996
- [17] C.C.J Roothan; *New Developments in Molecular Orbital Theory*, Rev. Mod. Phys. **23**, 69, 1951.
- [18] G.Cuevas y F.Cortés; *Introducción a la Química Computacional*, Fondo de Cultura Económica, México 2003.
- [19] Axel D. Becke; *Density Functional thermochemistry. III. The role of exchange* J. Chem. Phys. 98 (7), 1 April, 1983
- [20] Chengteh Lee, Weitao Yang y Robert G. Parr; *Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density* Physical Review B. Vol. 37,2. 15 Enero, 1981
- [21] Joachim Paier, Martijn Marsman, y Georg Kresse; *Why does the B3LYP hybrid functional fail for metals?* The Journal of Chemical Physics 127, 024103, 2007
- [22] Rudolf Janoschek; *Quantum Chemicaio B3LYP/cc-pvqz computation of ground-state structure and properties of small molecules whith atoms of $Z \leq 18$* Pure Appl. Chem., Vol. 73, No. 9, pp. 1521–1553, 2001.
- [23] James P. Finley; *Using the local density approximation and the LYP, BLYP y B3LYP funcional within reference-state one-particle density-matrix theory* MOLECULAR PHYSICS, VOL. 102, NO. 7, 627–639, 10 APRIL 2004.
- [24] R. Carbo y J.M. Riera; *A General SCF Theory in Lectures Notes in Chemistry*, Editores: G. Berthier, MJS Dewar, H. Fischer, K. Fukui, H. Hartmann, HH Jaffé, J. Jortner, W. Kutzelnigg, K. Ruedengerg, Es Scrocco. Vol 5. Springer Verlang Berlin107, 1978.
- [25] Ira N. Levine; *Quantum Chemistry*, Prentice Hall INC, 4ta edición, 1991
- [26] J.A. Pople, R. Krishnan y J.S. Binkley. *Int J. Quantum Chem* Quantum Chem Symp, 13, p. 225, (1977)
- [27] W. J. Hehre, R. F. Stewart y J. A. Pople; *Self-Consistent Molecular-Orbital Methods. I. Use of Gaussian Expansions of Slater-Type Atomic Orbitals* J. Chem. Phys. 51 p.2657, 1969.
- [28] <https://bse.pnl.gov/bse/portal> (Mayo-Agosto 2009)
- [29] <http://www.cup.uni-muenchen.de/ch/compchem/pop/nbo2.html> (Mayo 2009)
- [30] Gaussian 03, Revision E.01, M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, J. A. Montgomery, Jr., T. Vreven, K. N. Kudin, J. C. Burant, J. M. Millam, S. S. Iyengar, J. Tomasi, V. Barone, B. Mennucci, M. Cossi, G. Scalmani, N. Rega, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, M. Klene, X. Li, J. E. Knox, H. P. Hratchian, J. B. Cross, V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R. E. Stratmann, O. Yazyev, A. J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J. W. Ochterski, P. Y. Ayala, K. Morokuma, G. A. Voth, P. Salvador, J. J. Dannenberg, V. G. Zakrzewski, S. Dapprich, A. D. Daniels, M. C. Strain, O. Farkas, D. K. Malick, A. D. Rabuck, K. Raghavachari, J. B. Foresman, J. V. Ortiz, Q. Cui, A. G. Baboul, S. Clifford, J. Cioslowski, B. B. Stefanov, G. Liu, A. Liashenko, P. Piskorz, I.

- Komaromi, R. L. Martin, D. J. Fox, T. Keith, M. A. Al-Laham, C. Y. Peng, A. Nanayakkara, M. Challacombe, P. M. W. Gill, B. Johnson, W. Chen, M. W. Wong, C. Gonzalez, and J. A. Pople, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2004.
- [31] http://www.gaussian.com/g_tech/g_ur/1keywords09.htm (Enero-Julio 2009)
- [32] http://en.wikipedia.org/wiki/Spontaneous_symmetry_breaking (Junio-Diciembre 2009)
- [33] John C. Tully; *Nonadiabatic Dynamics*, Editor Donald L. Thompson, Modern Methods for Multidimensional Dynamics computations in Chemistry, World Scientific, 1999.
- [34] H. Jahn y E. Teller; *Stability of Polyatomic Molecules in Degenerate Electronic States*, Proc. Royal Soc. Lond. Series A, Math. Phys. Sci. 161 p. 220, 1937.
- [35] <http://www.webqc.org/symmetrypointgroup-d2h.html> (Junio-Diciembre 2009)
- [36] <http://www.webqc.org/symmetrypointgroup-c2v.html> (Junio-Diciembre 2009)
- [37] <http://www.webqc.org/symmetrypointgroup-c2h.html> (Junio-Diciembre 2009)
- [38] Heine Volker; *Group Theory in Quantum Mechanics*. Dover Publications, INC, NY 1993.
- [39] J.J.Sakurai; *Modern Quantum Mechanics*, Addison-Wesley Publishing Company Inc. 1994.
- [40] B. Trzaskowski A. F. Jalbout, L. Adamowicz; *Functionalization of carbon nanocones by free radicals. A theoretical study* Chem. Phys. Lett. 444 p. 314 2007
- [41] D. V. Khveshchenko; *Coulomb interacting Dirac fermions in disordered graphene* Phys. Rev. B 75 p.89, 2007
- [42] <http://www.ua.es/cuantica/docencia/ccem/teoria/node1.html> (Septiembre-Diciembre 2009)
- [43] <http://www3.uji.es/calatayu/adsorcion.html> (Julio-Septiembre 2009)
- [44] K.R.S Chandrakumar y Swapar K. Ghosh; *Alkali-Metal Induced Enhancement of Hydrogen Adsorption in C60 Fullerene: An ab Initio Study* Nano Letters Vol. 8, No.1 13-19, 2008.
- [45] Yong-Tao Shen, Ke Deng, Qing-Dao Zeng y Chen Wang; *Size-Selective Effects on Fullerene Adsorption by Molecular Networks*, Wiley Inter Science, small6, No.1, 76-80 2010
- [46] Young-Woo Son, Marvin L. Cohen y Steven G. Louie; *Energy Gaps in Graphene Nanoribbons* Physical Review Letters 97, 2006
- [47] B. Arnaud, S. Lebegue, P. Rabiller y M. Alouani; *Huge Excitonic Effects in Layered Hexagonal Boron Nitride* Physical Review Letters 96, 2006
- [48] Kenji Watanabe y Takashi Taniguchi, *Jahn-Teller on exciton states in hexagonal boron-nitride single crystal* Physical Review B 79, 193104 2009.
- [49] S. Gasiorowicz; *Quantum Physics*. Jon Wiley and Sons, Inc. 1974.
- [50] Zhiming M. Wang, Andreas Waag, Gregory Salamo, Naoki Kishimoto *Lecture Notes in Nanoscale Science and Technology* Vol. 6 Springer 2009.
- [51] http://www.ccqc.uga.edu/lec_top/rltvt/node22.html (Mayo-Julio 2009)

- [52] <http://www.emsl.pnl.gov/docs/nwchem/doc/user/node10.html> (Abril-Agosto 2009)
- [53] David K. Ferry, Stephen M. Goodnick y Jonathan Bird; *Transport in Nanostructures*, Cambridge University Press (2009).
- [54] Wilhelm T. S. Huck; *Nanoscale Assembly Techniques* Springer (2005).
- [55] Marisel Maubert, Laura Soto; *Nanotubos de Carbono - La era de la Nanotecnología* Tesis, Universidad Autónoma Metropolitana, (2009)
- [56] S. Datta; *Electronic Transport in Mesoscopic Systems* Cambridge University Press (1995).