



El modelo de solvente continuo visto como un confinamiento espacial

Mariano Rodríguez-Bautista,¹ Norberto Aquino-Aquino,² y Jorge Garza¹

¹Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, Departamento de Química; México

²Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, Departamento de Física; México
marianorodbau@gmail.com

Durante mucho tiempo la gente que utiliza modelos de solvente continuo para estudiar sistemas solvatados, en especial aquellos que involucran un campo de reacción, no toman en cuenta la limitación espacial que tiene involucrada dicho modelo. Por tal motivo usan funciones de base que han sido construidas para átomos libres. Recientemente se ha hecho una crítica muy fuerte en este sentido, pero por mala fortuna, los autores que han expresado dicha crítica no han tomado correctamente el confinamiento impuesto por un dieléctrico continuo ^{1,2}. En este trabajo diseñamos un nuevo conjunto de funciones de base que toma en cuenta la limitación espacial del sistema de forma correcta.³ De esta manera, estudiamos átomos multielectrónicos limitados espacialmente por un dieléctrico isotrópico homogéneo lineal. Presentamos la solución de las ecuaciones de Hartree-Fock dentro del contexto de Roothaan. Los resultados obtenidos con esta propuesta, por ejemplo para He, Li, Na⁺ y F⁻ fueron comparados con el conjunto de funciones de base diseñadas para sistemas libres. En primer instancia, las energías que obtuvimos con nuestra propuesta son las más bajas cuando la limitación espacial es aplicada. Para los átomos con polarizabilidad grande el comportamiento de energías orbitales del core siempre son más bajas con respecto al átomo libre para confinamientos pequeños, este efecto jamás será observado con la base diseñada para sistemas libres. Como consecuencia, la base de sistemas libres siempre fallará en la predicción de la deslocalización de la densidad electrónica, lo cual implica que se tendrán estimaciones erróneas sobre el potencial de ionización de un átomo o que la polarización del medio quede descrita incorrectamente.

¹García, V.; Zorrilla, D.; Fernández, M. International Journal of Quantum Chemistry 2013, 113, 2172–2179.

²García, V.; Zorrilla, D.; Sánchez-Márquez, J.; Fernández-Núñez, M. International Journal of Quantum Chemistry 2016, n/a–n/a.

³Rodríguez-Bautista, M.; Díaz-García, C.; Navarrete-López, A. M.; Vargas, R.; Garza, J. The Journal of Chemical Physics 2015, 143,.