



Desarrollo de un método con separación por intervalos utilizando potenciales de Coulomb modelo.

Cristina González¹, Paul W. Ayers¹, Jacek Karwowski², Andreas Savin³
¹McMaster University; Canadá, ²Nicolaus Copernicus University; Polonia,
³CNRS, UPMC Paris 06; Francia.
e-mail: gonzalce@mcmaster.ca

Los métodos teóricos con separación por intervalos (Range-separated methods) son conocidos principalmente por su aplicación en aproximaciones basadas en la teoría de los funcionales de la densidad (DFT) para la construcción de funcionales híbridos sofisticados [1,2]. Por otro lado, Leininger *et al.* demostraron que al combinar la aproximación de densidad local a corta distancia (short-range LDA) y un método multireferencial con interacción de configuraciones (CI) que trata explícitamente la interacción entre electrones a larga distancia (long-range CI), se obtiene una mayor precisión en energías de disociación con respecto al DFT estándar y se reduce la dependencia en las funciones de base de los métodos multireferenciales, comparados con el método de CI puro [3].

El objetivo de este proyecto es el desarrollo de un método con separación por intervalos que pueda ser mejorado sistemáticamente. Primero, el potencial Coulómbico es remplazado con un potencial modelo que depende de un parámetro de alcance, μ , y que cumple con dos características principales: 1) conserva la descripción correcta de la interacción a larga distancia, y 2) elimina la singularidad del potencial original. Después, evaluamos las contribuciones de corta y larga distancia correspondientes, y calculamos la energía del sistema con el método de interacción de configuraciones completo (FCI).

En este trabajo presentamos los detalles de la construcción de dos potenciales modelo, su desempeño y su alcance al sustituir al potencial original. Además, detallamos la metodología empleada para evaluar la energía, y mostramos resultados preliminares en sistemas de 2 y 4 electrones.

Referencias:

1. Heyd, J.; Scuseria, G. E., Hybrid functional based on a screened Coulomb potential, *J. Chem. Phys.* **2003**, 118 (18), 8207-8125.
2. Chai, J.-D.; Head-Gordon, M., Systematic optimization of long-range corrected hybrid density functionals, *J. Chem. Phys.* **2008**, 128, 084106.
3. Leininger, T.; Stoll, H.; Werner, H.-J.; Savin, A., Combining long-range configuration interaction with short-range density functionals, *Chem. Phys. Lett.* **1997**, 275, 151-160.