



## FUNCIONALES DE INTERCAMBIO DEL TIPO GGA CON EL COMPORTAMIENTO ASINTÓTICO CORRECTO EN EL POTENCIAL.

Javier Carmona Espíndola<sup>1</sup>, José Luis Gázquez Mateos<sup>1</sup>, Alberto Vela<sup>2</sup>, Sam Trickey<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Química, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa; México D. F.

<sup>2</sup>Departamento de Química, CINVESTAV; México D. F.

<sup>3</sup>Quantum Theory Project, Department of Physics and Department of Chemistry, University of Florida, USA.

e-mail: jcarmona\_26@yahoo.com.mx

En este trabajo se presentan nuevos funcionales de intercambio del tipo GGA, los cuales presentan como principal característica que su primera derivada variacional,  $v_x$ , lleva al comportamiento asintótico correcto de  $-1/r$  [1-2]. Aunque estos funcionales son semilocales incorporan efectos de la discontinuidad en la derivada [3] de la teoría de funcionales de la densidad en el formalismo de Kohn-Sham.

La primera parte de la validación de estos funcionales comprende el estudiar propiedades termodinámicas, cinéticas y estructurales de sistemas que han sido altamente estudiados. Estos resultados muestran que estos nuevos funcionales son altamente competitivos con las aproximaciones actuales más empleadas. La segunda parte de este trabajo consiste en obtener resultados con la teoría de funcionales de la densidad dependiente del tiempo. Este segundo conjunto de resultados muestran que estos funcionales mejoran en una gran medida a las aproximaciones actuales más empleadas.

### Referencias:

1. Levy, M.; Perdew J. P.; Sahni V. *Phys. Rev. A* **1984**, 30, 2745-2748.
2. Almbladh C. O.; von Barth U. *Phys. Rev. B* **1985**, 31, 3231-3244.
3. Perdew J. P.; Parr R. G.; Levy M.; Balduz J. L. *Phys. Rev. Lett.* **1982**, 49, 1691-1694.