



## Desempeño de las aproximaciones al funcional de intercambio de Kohn-Sham en átomos confinados por paredes penetrables

Michael Adán Martínez Sánchez<sup>1</sup>, Mariano Rodríguez Bautista<sup>1</sup>, Jorge Garza<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departamento de química,

Universidad Autónoma Metropolitana,

San Rafael Atlixco No. 186, Col. Vicentina, Iztapalapa, Ap. Postal 09340, México.

e-mail: quim91adan@gmail.com

En el estudio de átomos confinados por paredes penetrables, las funciones tipo Gaussianas o tipo Slater son incapaces de dar una descripción correcta cuando se utilizan como funciones de base para representar a los orbitales de Kohn-Sham. Por lo tanto, en este trabajo se presenta la solución de las ecuaciones de Kohn-Sham empleando el método de Roothaan y un nuevo conjunto de funciones de base para este tipo de sistemas, implementando varios funcionales de intercambio y correlación.

Hemos comparado varios funcionales de intercambio, reportados en la literatura, con resultados obtenidos por el método de Hartree-Fock. De esta comparación se puede concluir que algunos funcionales diseñados dentro de la aproximación local o la aproximación generalizada por gradientes fallan para describir correctamente la energía de intercambio y las energías orbitales.

Además se implementó una forma de obtener el potencial de Kohn-Sham asociado a la densidad obtenida por el método Hartree-Fock, con el cual se pudo corroborar que el potencial de intercambio obtenido por funcionales comúnmente usados dan una descripción errónea.

Toda la implementación del método de Kohn-Sham se ha realizado en el código MEXICA-C[1] y se ha probado en átomos de capa cerrada donde se ha optimizado la base para cada átomo a diferentes radios de confinamiento y diferentes barreras de potencial.

[1] Garza J, Hernández-Pérez JM, Ramírez JZ, Vargas R (2012) Basis set effects on the Hartree-Fock description of confined many-electron atoms. *J Phys B: At Mol Opt Phys* 45:015002