

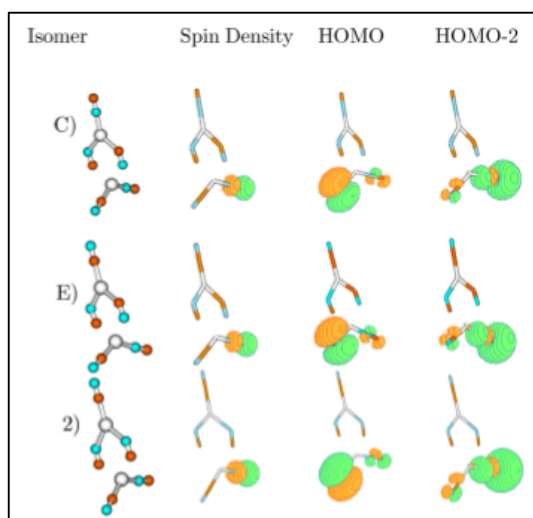
## Propagador de Electrón: Aplicación a superhalógenos

Manuel Díaz-Tinoco<sup>1</sup>, J. Vicente Ortiz<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Department of Chemistry & Biochemistry, Auburn University, Auburn, Alabama 36849-5312;  
U.S.A.

e-mail: mad0031@auburn.edu

La Teoría del Propagador de Electrón (EPT por sus siglas en inglés) ha sido consistentemente usada para la predicción de energías de liberación de electrón en transiciones verticales (VEDEs).<sup>1</sup> En trabajos anteriores EPT ha sido comparada con cúmulos acoplados de excitaciones sencillas y dobles con triples (CCSD(T) por sus siglas en inglés) dando discrepancias mayores a 1 eV.<sup>2</sup> Sin embargo, estos trabajos compararon directamente el orbital molecular de más alta energía (HOMO por sus siglas en inglés) con la solución de Hartree-Fock no restricto (UHF por sus siglas en inglés) lo cual es incorrecto en la presencia del defecto de Koopmans. En este trabajo, se comparan los resultados obtenidos con CCSD(T) y EPT correspondientes a diferentes soluciones UHF y orbitales moleculares de superhalógenos que han sido mapeados usando contornos de los orbitales moleculares del anión y las densidades de espín del neutro, con errores promedio y desviaciones estándar de 0.1 eV.<sup>3</sup>



(1) Ortiz, J. V. The Electron Propagator Picture of Molecular Electronic Structure. In *Computational Chemistry: Reviews of Current Trends*; J. Leszczynski, J., Ed.; World Scientific: Singapore, 1997; Vol. 2, pp 1; Ortiz, J. V. *WIREs Comput. Mol. Sci.* **2013**, *03*, 123.

(2) Li, M.-M.; Li, J.-F.; Bai, H.-C.; Sun, Y.-Y.; Li, J.-L.; Yin, B. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2015**, *17*, 20338; Li, J.-F.; Li, M.-M.; Bai, H.; Sun, Y.-Y.; Li, J.-L.; Yin, B. *ChemPhysChem*, **2015**, *16*, 3652.

(3) Díaz-Tinoco, M.; Ortiz, J.V. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2016**, *18*, 15456; Díaz-Tinoco, M.; Ortiz, J.V. *ChemPhysChem*, **2016**, *17*, 2945.