



## DENSTOOLKIT: UN PAQUETE INTEGRAL DE CÓDIGO LIBRE PARA ANALIZAR LA DENSIDAD ELECTRÓNICA Y SUS CAMPOS ESCALARES Y VECTORIALES ASOCIADOS

Juan Manuel Solano-Altamirano<sup>1</sup> y Julio Manuel Hernández-Pérez<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Facultad de Ciencias Químicas, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla,  
14 Sur y Av. San Claudio, Col. San Manuel, 72530 Puebla, México  
e-mail: jmsolanoalt@gmail.com

En este trabajo presentamos a DensToolkit [1], la cual es una suite de programas para analizar la densidad electrónica molecular, así como varios campos escalares y vectoriales derivados de ella. Entre estos campos se encuentran el gradiente de la densidad electrónica, la función de localización de electrones (LOL), el localizador de electrones localizados (ELF), regiones de electrones lentos (RoSE), densidad de entropía de Shannon, potencial electrostático molecular, densidades de energía cinética, matriz densidad de orden 1, entre otros. Estos campos pueden calcularse en espacios discretos (mallas) de 0, 1, 2 y 3 dimensiones, y algunas propiedades pueden graficarse directamente (éstas se generan internamente mediante llamadas a gnuplot). La suite también incluye programas para realizar una buena parte del análisis topológico de la densidad electrónica, tales como la búsqueda de puntos críticos y trayectorias de gradiente, y también programas para calcular densidad electrónica en espacio de momentos y la densidad de energía cinética en ese mismo espacio. En la última versión, la suite incluye un visualizador gráfico (en Qt) para analizar la topología de las moléculas. DensToolKit está implementado en C++, con un diseño apegado al modelo de programación orientada a objetos, lo cual permite que gran parte del código pueda sugerirse como biblioteca para realizar cálculos relacionados con el post-proceso de la densidad electrónica. DensToolKit puede utilizarse en Linux, MacOSX y Windows, y también puede compilarse, opcionalmente, una versión que utiliza OpenMP, la cual activa la paralelización con memoria compartida. Presentamos, además de la suite en sí, una serie de desarrollos en progreso y perspectivas.

[1] J. M. Solano-Altamirano; Julio M. Hernández-Pérez, *Comput. Phys. Commun.*, **2015**, 196 362-371.