



Implementación de un modelo Hartree-Fock que incluya el efecto de la temperatura en el contexto de APMO (Any Particle Molecular Orbital)

Juan Pablo Mojica Sánchez¹, Zeferino Gómez Sandoval¹

¹Facultad de Ciencias Químicas, Universidad de Colima, Km 9 Carretera Colima-Coquimatlán, Coquimatlán, Colima C.P. 28400, México.

mojica_sanchez@ucol.mx

La temperatura es una magnitud relacionada con la energía cinética promedio de un sistema, diferentes propiedades fisicoquímicas varían en función de la temperatura a la que se encuentren, como por ejemplo el estado físico y propiedades magnéticas y de reactividad (Castellan, 1983).

Los cálculos tradicionales ab-initio de estructura electrónica no incluyen la dependencia a la temperatura, por tal motivo se han desarrollado métodos a nivel Hartree-Fock (Sjostrom et al, 2012) y de teoría de funcionales de la densidad (Chai, 2012) que recuperan los efectos de temperatura bajo el ensamble gran canónico usando fracciones ocupacionales dadas por la estadística de Fermi-Dirac (Franco-Peréz et al, 2015). Una desventaja es que la dependencia de la temperatura solo se da en los grados electrónicos.

Es por ello que en este trabajo se propone una implementación computacional en C++ de un método Hartree-Fock de efectos térmicos que permita extenderse a los grados de libertad nucleares en el contexto de APMO (Díaz-Tinoco, 2013). El esquema de APMO permite trabajar con otras partículas de forma cuántica como los protones (H^+), a su vez dado que la dependencia a la temperatura se obtiene a partir de la función de Fermi-Dirac, es necesario fijar un potencial químico (μ). El potencial químico propuesto se calculó a partir de energías de ionización de cúmulos de agua protonados, neutros y aniónicos.

(1)Castellan, G. W. *Physical chemistry*, 3rd ed.; Addison-Wesley: Reading, Mass, 1983.

(2) Chai, J.-D. *The Journal of Chemical Physics* 2012, 136 (15), 154104.

(3) Sjostrom, T.; Harris, F. E.; Trickey, S. B. *Physical Review B* 2012, 85 (4).

(4) Díaz-Tinoco, M.; Romero, J.; Ortiz, J. V.; Reyes, A.; Flores-Moreno, R. *The Journal of Chemical Physics* 2013, 138 (19), 194108.

(5) Franco-Pérez, M.; Gázquez, J. L.; Vela, A. *The Journal of Chemical Physics* 2015, 143 (2), 24112.