



## MALLADO DE BECKE: IMPLEMENTACIÓN EN GPU PARA EVALUAR AADFT

Demetrio Cumplido Narciso, Xiaomin Huang, Jorge Martín del Campo  
Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México; México  
e-mail: dem9411@gmail.com

Denotamos como teoría de los funcionales de la densidad auxiliar aproximado (AADFT) cuando se emplea una densidad auxiliar para el ajuste del potencial de Coulomb y la evaluación del intercambio-correlación. En AADFT, se emplea la cuadratura de Becke<sup>1</sup> para generar mallados moleculares. Estos mallados permiten evaluar expresiones muy complejas que son difíciles de integrar analíticamente como el potencial de intercambio-correlación.

El mallado de Becke genera cuadraturas esféricas independientes centradas en cada átomo, tal que la parte radial se evalúa con la cuadratura radial de Gauss-Chebyshev y la parte angular mediante el mallado de Lebedev. Un peso de Becke se adiciona para ponderar qué tanto afecta cada punto del mallado sobre el átomo, siendo 1 cerca del átomo y 0 cuando está en la vecindad de otros.

En este trabajo presentamos la evaluación de los pesos de Becke, de acuerdo al esquema descrito por Luehr *et al.*<sup>2</sup> para la implementación de AADFT en tarjetas gráficas.

<sup>1</sup> Becke, A. D. A multicenter numerical integration scheme for polyatomic molecules. *J. Chem. Phys.* **1993**, *88*, 2547-2553.

<sup>2</sup> Luehr, N.; Ufimtsev, I. S.; Martinez, T. J. Dynamical Quadrature Grids: Applications in Density Functional Calculations. In *GPU Computing Gems*; Hwu, W. W., Ed.; Elsevier: Burlington, MA, 2011; p 35-42.