



DISEÑO DE UN NUEVO FUNCIONAL PARA LA ENERGÍA CINÉTICA EN LA APROXIMACIÓN DE GRADIENTE GENERALIZADO

Héctor Francisco¹, Javier Carmona-Espíndola¹, José L. Gázquez¹

¹Departamento de Química, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, San Rafael
Atlixco 186, Col. Vicentina, México, D. F. 09340, México.
hifr@xanum.uam.mx

La teoría de funcionales de la densidad [1] en el esquema de Kohn-Sham [2] es, en la actualidad, una de las herramientas más utilizadas para realizar estudios de estructura electrónica. Sin embargo, la dependencia en un conjunto de orbitales, de la densidad electrónica y de la energía cinética implica un esfuerzo computacional significativamente alto cuando se aplica a sistemas químicos con muchos átomos. Por esta razón, y atendiendo al espíritu original de Hohenberg y Kohn, la búsqueda de un funcional de la energía cinética que sólo dependa de la densidad electrónica es una alternativa interesante. En la aproximación de gradiente generalizado, la energía cinética se expresa como el producto de la aproximación de densidad local de Thomas-Fermi [3,4] y una función de exacerbamiento que se expresa en términos del gradiente reducido de la densidad, s . En este trabajo se presenta un nuevo funcional de energía cinética, en el que la función de exacerbamiento se obtiene haciendo una interpolación entre el comportamiento conocido cuando s tiende a cero, que básicamente corresponde al desarrollo en gradientes y el comportamiento cuando s tiende a infinito, que lleva al término de Weizsacker [5], y se muestran resultados para diferentes funciones de interpolación.

1. Hohenberg, P.; Kohn, W. *Phys. Rev.* 1964, 136, B864-B871.
2. Kohn, W; Sham, L. J. *Phys. Rev.* 1965, 140, A1133-1138.
3. Thomas, L. H. *Proc. Cam. Philos. Soc.* 1927, 23, 542-548.
4. Fermi, E. *Atti Accad. Nazl. Lincei.* 1927, 6, 602-607.
5. Weizsacker, C. F. *Z. Physik.* 1935, 96, 341-458.