



ENERGÍA INFORMACIONAL COMO UNA MEDIDA DE CORRELACIÓN ELECTRÓNICA EN SISTEMAS ATÓMICOS Y MOLECULARES

Nelson Flores Gallegos¹

¹Benemérita Universidad de Guadalajara, Centro Universitario de los Valles, Carretera
Guadalajara – Ameca km 45.5, CP 46600, Ameca, Jalisco, México.

En los 60s, Onicescu [1] definió una medida de información llamada energía informacional, $\varepsilon = \sum_{i=1}^n p_i^2$ en donde p_i son los elementos de una distribución probabilística y se encuentran sujetos a $0 \leq p_i \leq 1$. El término “energía” se debe a que al igual que la energía termodinámica, esta es una función convexa, y será máxima cuando $p_i = \frac{1}{N}$ y mínima cuando $p_i = 1$. Por otra parte, empleando la teoría de la matriz de densidad es posible obtener diferentes análisis de población, y en trabajos recientes [2-4] se ha mostrado que el análisis de población obtenido de una matriz de densidad con invarianza rotacional, no presenta una fuerte dependencia de la base o el método empleados. Asimismo, es común que en los estudios de estructura electrónica, se emplee la energía de correlación, definida como $E_{corr} = E_{ref} - E_{HF}$, en donde E_{ref} es el valor de la energía de una metodología, generalmente, multideterminantal y E_{HF} es la energía del método de Hartree-Fock. Entonces, si consideramos $E_{ref} = E_{CISD}$, así como sus correspondientes matrices de densidad, y aplicando el criterio de idempotencia, hemos definido la siguiente medida de correlación,

$$I_{corr} = \sum_{i=1}^n p_i^2 - 1, (1)$$

La cuál hemos aplicado a átomos y moléculas, y como mostraremos en el trabajo en extenso, hemos obtenido una excelente concordancia de las tendencias obtenidas con nuestra medida de correlación con respecto a la energía de correlación.

[1] O. Onicescu. Stud. Cercet. Matem. 18 (1966) 1419.

[2] I. Mayer. Chem. Phys. Lett. 393 (2004) 209.

[3] George Bruhn, Ernest R. Davidson, Istvan Mayer and Aurora E. Clark. Int. J. Quantum Chem. 105 (2006) 2065.

[4] A. E. Reed, R. B. Weinstock, and F. Weinhold, J. Chem. Phys. 83 (1985) 735.