

Funcionales cinéticos adecuados para la realización de dinámica molecular en sistemas electrónicos

David García Aldea*, José Enrique Alvarellos Bermejo*

Departamento de Física Fundamental, Universidad Nacional de Educación a Distancia, Apartado 60.141, 28080 Madrid, Spain.

La realización de dinámica molecular mediante el método de Car-Parrinello¹ en sistemas electrónicos reviste una gran importancia, ya que se podrían calcular un gran número de sistemas de mucho interés. Para que tales cálculos resulten factibles desde el punto de vista del coste computacional es necesario disponer de un método de cálculo de estructura electrónica de bajo coste.

La teoría del funcional de la densidad en su esquema "orbital-free" es el método de cálculo de estructura electrónica que presenta el más bajo coste computacional, ya que dicho coste escala linealmente con el tamaño del sistema. La aplicación de este esquema requiere la construcción de funcionales cinéticos aproximados, que sean capaces de dar cuenta de la energía cinética de distribuciones de densidad electrónica. Los últimos funcionales formulados²⁻⁴ reproducen límites físicos que son importantes para el cálculo de distintos sistemas reales y poseen novedosas formas matemáticas.

En este trabajo se presentan funcionales cinéticos com-

pletamente no locales que han resultado ser los más exitosos. También se discuten los resultados de aplicarlos a diversos sistemas modelo, lo que da una idea del potencial de estas nuevas herramientas. Finalmente, se relacionan estos funcionales con el concepto termodinámico de temperatura local electrónica⁵, que presenta un renovado interés teórico en el campo de la física estadística.

* dgaldea@fisfun.uned.es

* jealvar@fisfun.uned.es

¹ R. Car and M. Parrinello, Phys. Rev. Lett. 55, 2471 (1985)

² D. García-Aldea and J. E. Alvarellos, J. Chem. Phys. 127, 144109 (2007)

³ D. García-Aldea and J. E. Alvarellos, Phys. Rev. A 76, 052504 (2007)

⁴ D. García-Aldea and J. E. Alvarellos (submitted to PRA).

⁵ S. K. Ghosh, M. Berkowitz and R. G. Parr, Proc. Natl. Acad. Sci. USA 81, 8028 (1984).