

FUNCIONALES DE LA DENSIDAD DEL TIPO THOMAS-FERMI-AMALDI Y REACTIVIDAD QUÍMICA

M. Cristina Donnamaria

**Instituto de Física de Líquidos y Sistemas Biológicos-IFLYSIB
(CONICET-UNLP), calle 55 N° 910, Anexo IFLYSIB, 1900 La Plata,
Argentina, donna@iflysib.unlp.edu.ar**

Los Funcionales de la Densidad (FD) constituyen alternativas atrayentes a los cálculos mecánico cuánticos, constituyendo un método de modelización mecánico-cuántico utilizado en Física y en Química para investigar propiedades ligadas a la estructura electrónica (principalmente en el estado fundamental) de sistemas “de muchos cuerpos”, entre ellos átomos, moléculas y fases condensadas. En ellos, la energía es función de la densidad electrónica del sistema (observable físico), lo que permite obviar el tratamiento de la función de onda asociada. El FD del tipo Thomas Fermi (TF) es el más sencillo de los funcionales, que se comporta adecuadamente en situaciones de densidad electrónica lentamente variable. La corrección de Amaldi, (conjuntamente con una densidad electrónica parametrizada) dentro de este formalismo, no sólo quita la auto interacción espuria entre electrones sino que también permite el tratamiento directo de especies iónicas, mediante relaciones analíticas. En particular en este trabajo se aplica el método de funcionales del tipo TFA a 44 átomos neutros de la tabla periódica, pertenecientes a los períodos del Ar, Kr y Xe- y a sus primeros cationes. Se omiten los primeros períodos por no comportarse apropiadamente y los últimos por cuestiones de simplicidad. En el presente formalismo, de Thomas-Fermi-Amaldi, entre algunas propiedades de reactividad química, se evaluó la propiedad “blandura” (para los elementos de la tabla periódica considerados y sus primeros iones positivos) como derivadas sencillas de la función energía. La relación entre el concepto “blandura global” (S) y “polarizabilidad dipolar estática eléctrica (α)” brinda interesante información fisicoquímica. Un resultado interesante consiste en que “ S ” se relaciona linealmente con $\alpha^{1/3}$. Asimismo las propiedades fisicoquímicas evaluadas están correlacionadas con ecuaciones paramétricas sencilla del modelo que permiten caracterizar la naturaleza reactiva de las especies atómicas y iónicas consideradas.

MCD es Investigadora de la Comisión de Investigaciones Científicas de la Prov. de Bs, As –CICPBA- institución a la que agradece subsidio personal de Investigación y Desarrollo.