



CÁLCULO EFICIENTE DEL TENSOR ROTACIONAL-G USANDO LA TEORÍA DE LOS FUNCIONALES DE LA DENSIDAD AUXILIAR

MONICA ARACELI CAMACHO GONZALEZ², Bernardo Zuñiga Gutiérrez¹, Patrizia Calaminici³, Andreas Köster⁴,
Monica Camacho Gonzalez², Patricia Simón Bastida⁵ y Rene A. Bendaña Castillo²

1 Universidad de Guadalajara, 2 Universidad Tecnológica de Tecámac, 3 CINVESTAV ZACATENCO, 4 CINVESTAV
ZACANTENCO, 5 Universidad Tecnológica de Tulancingo (CTOF-Utec). bzuniga.51@gmail.com

El tensor rotacional-g es la interacción entre un campo magnético externo y el momento magnético inducido, éste se calcula con la teoría de los funcionales de la densidad auxiliar (ADFT, por sus siglas en inglés). El esquema de gauge incluido en orbitales atómicos (GIAO, por sus siglas en inglés) trata el problema del origen del gauge. Esta metodología, llamada ADFT-GIAO1, calcula las propiedades magnéticas a un costo computacional menor que la convencional DFT. Con la nueva metodología se implementa el cálculo del tensor rotacional-g dentro del código deMon2k2.

Se presenta la validación de los resultados teóricos del tensor rotacional-g, comparados con los experimentales de 61 moléculas. Se estudia el efecto empleando las bases de Dunning en combinación con funcionales de intercambio y correlación. Dicha eficiencia permite calcular propiedades moleculares tipo Born-Oppenheimer (BOMD, por sus siglas en inglés) mejorando la calidad de resultados teóricos con respecto a los experimentales. Finalmente, se muestran los valores del tensor rotacional-g para nanotubos de carbonos que contienen hasta 1,000 átomos y 15,000 funciones de base.

1 B. Zuniga-Gutierrez, G. Geudtner y A. M. Köster, J. Chem. Phys. 137, 094113 (2012).

2 www.demon-software.com