

Molecular Electron Densities and Density Functional Theory

Russell, J. Boyd
Dalhousie University
Department of Chemistry
Halifax, Nova Scotia
Canada B3H 4J3

BIBLID [1137-4411 (1997), 4; 5-28]

Dentsitate funtzionalaren teoria erabiliz, propietate elektronikoak kalkulatzeko egin diren azkenengo aurrerapenak aurkeztu dira. Bereziki, zenbait molekula txikiren dentsitate elektronikoa, hainbat trukaketa eta korrelazio funtzionalekin kalkulatuta, konfigurazio interakzio kuadratikoren ereduak emandako emaitzekin alderatuko ditugu. Honela, funtzional berriak sortzeko edota daudenak hobeto parametrizatzeko erizpideak azaleratu eta aztertuko ditugu.

Se presenta una revisión de los progresos recientes en el cálculo de propiedades electrónicas mediante métodos del funcional de la densidad. Nos centraremos en la comparación de la densidad electrónica de moléculas pequeñas calculada con diferentes funcionales de correlación e intercambio con los resultados obtenidos con el método de iteraciones de configuración cuadráticas. Por último, los criterios para el desarrollo y parametrización de nuevos funcionales a partir de densidades electrónicas *ab initio* de alto nivel para métodos del funcional de la densidad serán discutidos.

On présente une révision des progrès récents sur le calcul des propriétés électroniques grâce aux méthodes de densités fonctionnelles. On va fixer notre attention à la comparaison de la densité électronique des petites molécules, calculée avec des différentes fonctions de corrélation et d'échange, avec les résultats obtenus avec la méthode d'interactions de configuration quadratique. Finalement, on discutera les critères pour le développement et paramétrisation des nouvelles fonctions à partir de densités électroniques *ab initio* de haut niveau pour des méthodes de densités fonctionnelles.

Giltz-Hitzak: Dentsitate elektrikoa. Dentsitate Funtzionalaren Teoria.
Palabras Clave: Densidad electrónica. Teoría del Funcional de la Densidad.
Mots Clés: Densité Electronique. Theorie du Fonctionale de la Densité.