

ESCUELA POLITÉCNICA NACIONAL
FACULTAD DE CIENCIAS
PLAN DE PROYECTO DE TITULACIÓN
CARRERA DE FÍSICA

| | |
|---|---|
| PROPUESTO POR: Javier Corregidor | LÍNEA DE INVESTIGACIÓN: Física Teórica |
| | SUBLÍNEA DE INVESTIGACIÓN: Fundamentos de Teoría Cuántica |
| AUSPICIADO POR: Dr. Eduardo V. Ludeña | FECHA: 7 de junio de 2015 |

1. Título del Proyecto de Titulación

PROBLEMA DE LA N-REPRESENTABILIDAD FUNCIONAL EN LA TEORÍA DEL
FUNCIONAL DE LA DENSIDAD PARA SISTEMAS CUÁNTICOS Y SU
EXTENSIÓN A SISTEMAS CLÁSICOS.

2. Planteamiento del Problema

La Teoría del Funcional de la Densidad, DFT, (de sus siglas en inglés: "Density Functional Theory") diseñada originalmente por Hohenberg, Kohn y Sham [1, 2, 3] para el cálculo de la energía del estado fundamental de sistemas cuánticos (i.e., átomos, moléculas, materia condensada) ha sido extendida por Evans para tratar sistemas clásicos.[4]. La extensión de DFT hecha por Evans para sistemas clásicos se basa en el trabajo de Mermin[5] en el cual se desarrolla una versión de DFT para sistemas a temperatura finita por medio de la introducción de la función de energía libre del ensamble macro canónico. A esto se añade un principio variacional (desigualdad de Gibbs) y se formula la energía libre como un funcional de la densidad de una partícula.

La teoría clásica del funcional de la densidad, cDFT [6, 7] crea las bases para la determinación de las propiedades termodinámicas y las funciones de correlación de una amplia variedad de modelos para fluidos no homogéneos. Esto se hace partiendo de un Hamiltoniano modelo de tipo microscópico que describe las interacciones entre las "partículas" del líquido no homogéneo.[8, 9] En realidad estos tipos de modelos parten de una definición de partícula a nivel microscópico en donde éstas no son electrones ni núcleos atómicos (o iones), como ocurre en el caso cuántico, sino que son porciones de materia (átomos, grupos de átomos, moléculas, etc.) que interactúan entre sí por medio de potenciales $U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ y con campos externos $V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ pero que mantienen sus características durante los procesos físicos a estudiar.

En cDFT se supone que el potencial del ensamble macro canónico para un fluido no homogéneo específico es un funcional de la densidad promedio de una partícula $\rho(\mathbf{r}_i)$ en donde \mathbf{r}_i es la coordenada de la posición en el espacio de la partícula i . [7].

La derivación en el caso clásico de cDFT procede por medio de una extensión del teorema de Hohenberg-Kohn-Mermin a través de la cual se establece una relación de uno-a-uno entre el potencial externo y la densidad de una partícula.[4, 10] Sin embargo, en la definición del correspondiente funcional de la densidad para sistemas clásicos es necesario hacer la suposición de que $F_{ex}[\rho]$, o sea la parte del funcional que describe los efectos de “exceso” en un fluido, por ejemplo, provienen del Hamiltoniano original del sistema y de su correspondiente densidad de probabilidad en el equilibrio. Justamente, la determinación de las condiciones que deben cumplirse para que esta suposición sea cierta, constituyen el problema de la N -representabilidad del sistema clásico.[11] Este problema es el objeto principal de investigación en la presente tesis.

2.1. Tomado de la parte cuatro del anterior documento

El éxito que ha tenido la teoría del funcional de la densidad, DFT, para la determinación de la estructura electrónica de átomos, moléculas y materia condensada, la ha potenciado también en otras áreas como la de los fluidos no homogéneos clásicos, para cuyo tratamiento se ha desarrollado la versión clásica de la teoría, cDFT. El trabajo fundamental en esta extensión ha sido hecho por Evans. [4].

En la actualidad esta versión de DFT ha tenido un crecimiento acelerado debido a su importancia para tratar los problemas de líquidos no homogéneos.[7, 12].

Sin embargo, en la versión cuántica de Hohenberg-Kohn-Sham de la teoría, existen unas condiciones fundamentales de N -representabilidad del funcional $F[\rho]$ que deben ser obedecidas para que la energía sea una cota superior de la energía exacta.

Para poner en contexto la discusión sobre la N -representabilidad, consideremos primero, este problema para la matriz 2.

El problema de la N -representabilidad en la teoría de la matriz reducida de orden 2

De la mecánica cuántica se conoce que la estructura del Hamiltoniano para un sistema de N electrones en la aproximación de Born-Oppenheimer está compuesto de al menos tres partes, una concerniente a la energía cinética, otra que corresponde al potencial repulsivo entre electrones y otro que describe a la interacción de los electrones que componen el sistema con un potencial externo. Además es bien conocido que la energía del sistema se expresa como un funcional de la función de onda normalizada, que se escribe de la siguiente forma:

$$E[\Psi] \equiv \langle \Psi | \hat{H}^N | \Psi \rangle \quad (1)$$

Donde E se usa para la energía, Ψ es la función de onda que describe al sistema de N partículas y \hat{H}^N es el hamiltoniano para N partículas. También es conocido que la energía del estado fundamental se obtiene mediante la minimización de ese funcional, ese mínimo cumple con la ecuación de Schrödinger.

Es fácil demostrar que este hamiltoniano contiene términos que incluyen operadores de, a lo más, dos partículas, este hecho nos permite no solamente reescribir la forma del hamiltoniano habitual, sino reformular su estructura en términos de estos operadores que en principio describen interacciones entre pares de partículas.

La introducción de la matriz reducida de segundo orden (normalizada) correspondiente a una función de onda específica nos permite reescribir la energía como un funcional de esta matriz, de la siguiente forma:

$$E[\Psi] = Tr[\hat{K}_2^N D_\Psi^2] \quad (2)$$

En donde $\hat{K}_2^N D_\Psi^2$ es el operador entre pares de partículas, mencionado arriba, y D_Ψ^2 representa a la matriz reducida de segundo orden, también mencionada arriba.

Así la energía del estado fundamental puede obtenerse minimizando el funcional:

$$E_0 = \inf_{\substack{\Psi \in \mathcal{L}_N \\ D_\Psi^2 \in \mathcal{P}_N^2[\Psi]}} \left\{ Tr[\hat{K}_2^N D_\Psi^2] \right\} \quad (3)$$

en donde \mathcal{L}_N es el espacio de Hilbert de funciones de onda de N partículas y $\mathcal{P}_N^2[\Psi] = \{D_\Psi^2 : \hat{L}_2^N |\Psi\rangle\langle\Psi|, \Psi \in \mathcal{L}_N\}$ es el conjunto de funciones de matrices normalizadas de orden 2 que pueden obtenerse de funciones de onda de N partículas. Sin embargo, con la intención de deslindarse de cualquier referencia a funciones de onda específicas, se considera el siguiente problema variacional:

$$E_0 = \inf_{D^2 \in \mathcal{P}_N^2 = \{D^2 | \text{condiciones de N-representabilidad}\}} \left\{ Tr[\hat{K}_2^N D^2] \right\} \quad (4)$$

donde $\mathcal{P}_N^2 = \{D^2 | \text{condiciones de N-representabilidad}\}$.

La minimización de la expresión para la energía sin la imposición de ninguna condición sobre la matriz de densidad reducida de orden 2, 2-MRD, lleva a valores de la energía que están por debajo del valor exacto en el caso del estado fundamental. A este resultado Coleman lo llamó "El problema de la N-representabilidad de la matriz 2". Este problema aparece puesto que es necesario la aplicación de condiciones sobre la 2-MRD con el fin de garantizar que esta provenga de una matriz de orden N, es decir que provenga de una función de onda de N partículas. En este punto, la teoría de la 2-MRD tiene que ver con la determinación de tales condiciones. Hay que notar que si no hubiera la necesidad de imponer las condiciones de N-representabilidad, entonces el problema de N partículas tendría solamente la dificultad del problema de dos partículas.

Las condiciones exactas, en el sentido formal, de la N-representabilidad son conocidas [11], desde hace un tiempo considerable:

D^2 es N-representable si y solo si para todo Hamiltoniano de N partículas, \hat{H}^N , se satisface la siguiente desigualdad.

$$E_0[\hat{H}^N] \leq Tr[\hat{K}_2^N D^2] \quad (5)$$

Una D^2 que no satisface esta condición, no es N-representable. Recíprocamente, si una D^2 no es N-representable, entonces existe por lo menos un \hat{H}^N que violará esta última ecuación.

El problema de la N-representabilidad en DFT

En la descripción del hamiltoniano para N partículas que vimos anteriormente, podemos hacer una clara separación en dos partes, una parte que contiene la información concerniente a la energía cinética y junto a este, el potencial electrónico repulsivo entre pares de partículas y otra parte que da cuenta del potencial externo; como sabemos la primera parte es universal para cualquier sistema de N partículas y una minimización de la energía incluye también una minimización de esta primera parte. En el contexto de la variación restringida de Levy [13], el funcional universal está definido por:

$$F[\rho] = \inf_{\rho \in \mathcal{J}_N} \left\{ \langle \Psi_\rho | \hat{T} + \hat{V}_{ee} | \Psi_\rho \rangle \right\} \quad (6)$$

En donde \hat{T} y \hat{V}_{ee} son el operador de energía cinética y el potencial electrónico repulsivo respectivamente, además la función de onda de N partículas corresponde a una densidad fija ρ . En analogía con el proceso descrito para la matriz 2, la estructura de este funcional, nos permite reescribirlo en términos de operadores de dos partículas y por consiguiente reescribir también la ecuación 12 como:

$$F[\rho] = \inf_{\substack{\rho \in \mathcal{J}_N \\ D_\rho^2 \rightarrow \rho(\text{fijo})}} \left\{ \text{Tr}[\hat{K}_{2(0)}^N D_\rho^2] \right\} \quad (7)$$

Y además el correspondiente problema de optimización para la energía del estado fundamental:

$$E_0 = \inf_{\rho \in \mathcal{J}_N} \left\{ F[\rho] + \int d^3\mathbf{r} v(\mathbf{r}) \right\} \quad (8)$$

Hay que notar la sorprendente similitud entre las ecuaciones 8 y 14 (segunda nos da la definición del funcional universal $F[\rho]$), nos permite concluir que este funcional exacto solamente puede ser caracterizado plenamente en términos de las condiciones de N-representabilidad de 2-MRD.

Se ha extendido la creencia de que no hay tal problema como el de la N-representabilidad para la versión de Hohenberg-Kohn-Sham de DFT (HKS-DFT), ya que se consideraba que la única condición a imponerse era la N-representabilidad de la densidad, es decir que la densidad provenga de una función de onda de N electrones, y Gilbert [14] ya había probado que cualquier densidad ρ es N-representable. Con lo cual se daba por descontado el problema.

Sin embargo el problema de la N-representabilidad en DFT tiene que ver con la N-representabilidad del funcional exacto $F[\rho]$ o de las aproximaciones de este que se usan en la práctica. Recientemente se ha reconocido a este problema como el principal limitante en el desarrollo de la versión HKS de DFT por Ludena et al [15]. En este sentido, las soluciones formales (necesarias y suficientes) para el problema de la N-representabilidad funcional de $F[\rho]$ han sido propuestas por Ayers y Liu [16] y una aún más práctica por medio de un principio variacional para el hueco de intercambio propuesto por Ayers, Cuevas-Saavedra y Chakraborty [17].

Sin embargo, a pesar de este reconocimiento formal, poco se ha avanzado con respecto a la imposición de estas condiciones de N-representabilidad en la construcción de los

funcionales usados comunmente en DFT. De hecho la gran mayoría de funcionales utilizados no cumplen con estas condiciones y se utilizan dada su facilidad y simpleza a la hora de mostrar resultados. Se debe acotar que los funcionales desarrollados en el contexto de la versión de Escalamiento Local de DFT han sido construidos en forma explicita para que cumplan con estas condiciones [18, 19, 20].

El Problema de la N-Representabilidad en cDFT

Puesto que se conoce bastante sobre el problema de la N-representabilidad en HKS-DFT, se propone realizar el mismo tipo de análisis a la extensión de esta teoría, presente en la formulación para el ensamble macro canónico aplicado a la versión clásica de la teoría del funcional de la densidad, cDFT.

En este punto es necesario desarrollar de forma descriptiva la formulación de cDFT, obviamente esto incluirá el tratamiento mediante operadores de índole clásica,

Tomando el trabajo de Evans[4], consideremos el siguiente Hamiltoniano clásico:

$$\hat{H}_N = \hat{T} + \hat{U} + \hat{V} \quad (9)$$

en donde la energía cinética clásica de N partículas de masa m es:

$$\hat{T} = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} \quad (10)$$

y el potencial entre las partículas es:

$$U \equiv U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) \quad (11)$$

en este caso, a diferencia del caso cuántico, el potencial entre las partículas que conforman el sistema no está restringido a interacciones entre pares de estas; y por último el potencial externo (interacción de las partículas con el campo externo) es:

$$V \equiv V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_{i=1}^N V_{ext}(\mathbf{r}_i) \quad (12)$$

Una cantidad básica en el desarrollo de cDFT es la densidad de una partícula $\rho(\mathbf{r})$ la cual viene definida como:

$$\rho(\mathbf{r}) = \langle \hat{\rho}(\mathbf{r}) \rangle \quad (13)$$

en donde el operador de la densidad de una partícula está dado por:

$$\hat{\rho}(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \quad (14)$$

y la operación indicada entre corchetes angulares es la traza clásica dada por

$$\langle \hat{O} \rangle \equiv Tr_{cl} f_o \hat{O} \quad (15)$$

en donde la operación de traza está explícitamente dada por

$$Tr_{cl} \equiv \sum_{N=1}^{\infty} \int d\mathbf{r}_1 \dots \int d\mathbf{r}_N \int d\mathbf{p}_1 \dots \int d\mathbf{p}_N \quad (16)$$

En esta definición, $\int d\mathbf{r}_i$ denota la posición en el espacio de coordenadas de la partícula i y similarmente, $\int d\mathbf{p}_i$, el momento de la partícula i en el espacio de momentos.

La función de distribución f_o es una cantidad básica que se conoce también como la densidad de probabilidad en el equilibrio y viene definida por

$$f_o = \frac{1}{\Xi} \exp(-\beta(\hat{H}_N - \mu N)) \quad (17)$$

en donde Ξ es la función de partición del ensamble macro canónico:

$$\Xi \equiv Tr_{cl} \exp(-\beta(\hat{H} - \mu N)) \quad (18)$$

En esta expresión, μ es el potencial químico y $\beta \equiv 1/K_B T$, en donde T es la temperatura del sistema.

La extensión de DFT al dominio clásico, se hace, siguiendo el trabajo de Mermin [5] a través de la introducción del funcional

$$\Omega[f] = Tr_{cl} f(\hat{H}_N - \mu N - \beta^{-1} \ln f) \quad (19)$$

Este funcional evaluado con la probabilidad de la densidad en el equilibrio da

$$\Omega[f_o] = -\beta^{-1} \ln \Xi \quad (20)$$

La versión clásica de DFT, cDFT, se basa en una extensión del teorema de Hohenberg-Kohn-Mermin a sistemas clásicos realizada por Evans (ver Apéndice de [4]). Esta extensión se realiza usando el mismo tipo de argumentación basada en el método de reducción al absurdo, del cual se desprende que hay una relación uno-a-uno entre las densidades de probabilidad en equilibrio, las densidades de una partícula y los potenciales externos:

$$\begin{aligned} f' &\longrightarrow \rho'(\mathbf{r}) \longleftrightarrow V'_{ext}(\mathbf{r}) \\ f_o &\longrightarrow \rho_o(\mathbf{r})' \longleftrightarrow V_{ext}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (21)$$

En los últimos años se han realizado dos intentos[21, 22] de proveer una justificación básica a la cDFT por medio de una argumentación similar a la de Levy en su definición del funcional de la densidad para un estado puro cuántico basándose en el método de variación restringida[21]. Pero, debido a las dificultades intrínsecas del método de Levy y la demostración que su definición del funcional $F[\rho]$ lleva implícitas las condiciones de N -representabilidad de la matrix 2, cabe suponer que en las extensiones de DFT a sistemas clásicos, debe estar también implícito el problema de la N -representabilidad del funcional $F_{ex}[\rho]$ el cual es un ingrediente básico del funcional para el ensamble macro canónico en el caso clásico.

3. Objetivos de la Investigación

3.1. Objetivo General

- El objetivo de este trabajo es examinar el problema de la N-representabilidad en la formulación clásica de la teoría del funcional de la densidad.

3.2. Objetivos Específicos

- Determinar la forma particular en que este problema reaparece en la formulación clásica de DFT, esto es, las condiciones que debe cumplir el funcional para ser N-representable.
- Examinar si aproximaciones simples al funcional de exceso $F_{ex}[n(\mathbf{r})]$ cumplen con las condiciones determinadas para la N-representabilidad.

4. Justificación del Proyecto

En el año de 1964 Garrod y Percus [11] propusieron varias ideas respecto al análisis de los requerimientos para el cumplimiento de las condiciones de N-Representabilidad que si bien resultaban en condiciones necesarias, aún estaban lejos de ser suficientes. El desarrollo del presente proyecto se basa en el hecho de que las condiciones de N-representabilidad han sido completamente determinadas para el caso cuántico por Mazzioti [23]. Sin embargo en el caso clásico se ha notado el resurgimiento de los problemas de N-representabilidad para la matriz de densidad de orden 2.

La importancia en el desarrollo de este proyecto radica en el éxito que ha tenido la teoría del funcional de la densidad, DFT, en la determinación de la estructura electrónica de átomos, moléculas y de materia condensada, estos logros han sido potenciados también en otras áreas como el tratamiento de fluidos no homogéneos clásicos, para cuyo entendimiento se ha desarrollado la versión clásica de la teoría, cDFT. El trabajo fundamental en esta extensión ha sido propuesto por Evans [4, 7], en estas publicaciones se han manifestado intereses relacionados con la naturaleza de la Interface Líquido-Vapor y el Equilibrio de Fluidos no homogéneos. Por otro lado Khal y Löwen han mostrado su interés en tópicos relacionados a los Fenómenos de Congelamiento y Dinámica en Cristales líquidos además de lo referente a su nucleación [8, 12].

La exhaustiva búsqueda de resultados en esta área ha provocado el desarrollo de esquemas computacionales que conducen a algoritmos de eficiencia comparable a los que han sido provistos por la mecánica cuántica. En ese orden, el estudio y posterior entendimiento de la extensión de DFT al caso clásico ayudaría sin lugar a dudas además en variados campos de la ingeniería en los cuales los cálculos y su eficiencia son de vital importancia.

5. Hipótesis de Trabajo

Basados en lo que se conoce en la actualidad respecto de las condiciones de N -representabilidad del funcional de la energía para un estado puro en HKS-DFT, es posible extender estos resultados al análisis de la N -representabilidad del potencial del ensamble macro canónico formulado para sistemas clásicos, en particular para los funcionales diseñados para líquidos no homogéneos.

6. Aspectos Metodológicos

- Análisis de las condiciones de N -representabilidad en el caso general de un ensamble macro canónico clásico.
- Análisis de los problemas en la formulación variacional del potencial macro canónico expresado como un funcional de la densidad electrónica.
- Análisis de las condiciones de N -representabilidad para el potencial macro canónico de un sistema clásico.

7. Referencias

- [1] P. Hohenberg and W. Kohn, “Inhomogeneous electron gas,” *Physical review*, vol. 136, no. 3B, p. B864, 1964.
- [2] W. Kohn and L. J. Sham, “Self-consistent equations including exchange and correlation effects,” *Physical Review*, vol. 140, no. 4A, p. A1133, 1965.
- [3] W. Kohn, “Nobel lecture: Electronic structure of matter-wave functions and density functionals,” *Reviews of Modern Physics*, vol. 71, no. 5, pp. 1253–1266, 1999.
- [4] R. Evans, “The nature of the liquid-vapour interface and other topics in the statistical mechanics of non-uniform, classical fluids,” *Advances in Physics*, vol. 28, no. 2, pp. 143–200, 1979.
- [5] N. D. Mermin, “Thermal properties of the inhomogeneous electron gas,” *Physical Review*, vol. 137, no. 5A, p. A1441, 1965.
- [6] J.-P. Hansen and I. R. McDonald, *Theory of simple liquids*. Elsevier, 1990.
- [7] R. Evans, *Density Functional Theory for Inhomogeneous Fluids I: Simple Fluids in Equilibrium*. No Publisher, 2009.
- [8] G. Kahl and H. Löwen, “Classical density functional theory: an ideal tool to study heterogeneous crystal nucleation,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 21, no. 46, p. 464101, 2009.
- [9] R. Wittkowski and H. Löwen, “Dynamical density functional theory for colloidal particles with arbitrary shape,” *Molecular Physics*, vol. 109, no. 23-24, pp. 2935–2943, 2011.
- [10] J. D. Weeks, “External fields, density functionals, and the gibbs inequality,” *Journal of statistical physics*, vol. 110, no. 3-6, pp. 1209–1218, 2003.
- [11] C. Garrod and J. K. Percus, “Reduction of the n-particle variational problem,” *Journal of Mathematical Physics*, vol. 5, no. 12, pp. 1756–1776, 1964.
- [12] H. Löwen, *Density Functional Theory for Inhomogeneous Fluids II: Freezing, Dynamics, Liquid Crystals*. No Publisher, 2009.
- [13] M. Levy, “Universal variational functionals of electron densities, first-order density matrices, and natural spin-orbitals and solution of the v-representability problem,” *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 76, no. 12, pp. 6062–6065, 1979.
- [14] T. Gilbert, “Hohenberg-kohn theorem for nonlocal external potentials,” *Physical Review B*, vol. 12, no. 6, p. 2111, 1975.

- [15] E. V. Ludeña, F. Illas, and A. Ramirez-Solis, “On the n -representability and universality of $f[\rho]$ in the hohenberg-kohn-sham version of density functional theory,” *International Journal of Modern Physics B*, vol. 22, no. 25n26, pp. 4642–4654, 2008.
- [16] P. W. Ayers and S. Liu, “Necessary and sufficient conditions for the n -representability of density functionals,” *Physical Review A*, vol. 75, no. 2, p. 022514, 2007.
- [17] R. Cuevas-Saavedra, D. Chakraborty, S. Rabi, C. Cárdenas, and P. W. Ayers, “Symmetric nonlocal weighted density approximations from the exchange-correlation hole of the uniform electron gas,” *Journal of Chemical Theory and Computation*, vol. 8, no. 11, pp. 4081–4093, 2012.
- [18] E. S. Kryachko and E. V. Ludeña, “Formulation of n - and v -representable density-functional theory. i. ground states,” *Physical Review A*, vol. 43, no. 5, p. 2179, 1991.
- [19] E. S. Kryachko and E. V. Ludeña, “Formulation of n - and ν -representable density functional theory. v. exchange-only self-consistent field,” *International journal of quantum chemistry*, vol. 43, no. 6, pp. 769–782, 1992.
- [20] E. V. Ludena, V. Karasiev, R. López-Boada, E. Valderrama, and J. Maldonado, “Local-scaling transformation version of density functional theory: application to atoms and diatomic molecules,” *Journal of computational chemistry*, vol. 20, no. 1, pp. 155–183, 1999.
- [21] W. S. B. Dwandaru and M. Schmidt, “Variational principle of classical density functional theory via levy’s constrained search method,” *Physical Review E*, vol. 83, no. 6, p. 061133, 2011.
- [22] M. Schmidt, M. Burgis, W. Dwandaru, G. Leithall, and P. Hopkins, “Recent developments in classical density functional theory: Internal energy functional and diagrammatic structure of fundamental measure theory,” *arXiv preprint arXiv:1212.6358*, 2012.
- [23] D. A. Mazziotti, “Two-electron reduced density matrix as the basic variable in many-electron quantum chemistry and physics,” *Chemical reviews*, vol. 112, no. 1, pp. 244–262, 2011.

8. Presupuesto y Fuentes de Financiamiento

Presupuesto aproximado:

Impresiones (Documentos, Borradores del proyecto) \$40.00

Material de oficina \$5.00

Preparación documento final \$50.00

Gastos de transporte \$30.00

Total \$125.00

El proyecto se realizará con fondos propios del autor.

9. Temario (tentativo)

- Capítulo 1. Introducción.
- Capítulo 2. Marco Teórico
- Capítulo 3. Funcional de la Energía Cinética.
- Capítulo 4. Ecuaciones de Euler y Aproximaciones.
- Capítulo 5. Comparación con Orbitales Monoelectrónicos.
- Capítulo 6. Análisis y Discusión de Resultados.
- Capítulo 7: Conclusiones.
- Bibliografía
- Anexos

10. Cronograma

En la tabla siguiente se muestra el cronograma de actividades previsto para el desarrollo del proyecto.

| Actividad | Mes | | | | | |
|--|-----|---|---|---|---|---|
| | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 |
| Revisión bibliográfica de los fundamentos | x | x | | | | |
| Obtención de las ecuaciones de Euler | | | x | x | | |
| Graficación y comparación de las densidades con las obtenidas con orbitales. | | | x | x | | |
| Análisis de resultados | | | | x | x | |
| Redacción del trabajo escrito | | | | | x | |
| Presentación del borrador | | | | | x | |
| Corrección del borrador | | | | | | x |
| Presentación del trabajo final y disertación del mismo | | | | | | x |

Dr. Eduardo Ludeña, Ph.D.
 Director
 Email: popluabe@yahoo.es
 Telf.: 0987983950

Javier Corregidor
 Estudiante
 Email: neajavierc@hotmail.com
 Telf.: 0991130096

Dr. Luis Celi, Ph.D.
 Co-Director
 Email: luis.celi@epn.edu.ec
 Telf.: 0998203689