

UNIVERSIDAD DE CÓRDOBA

Facultad de Ciencias

Grado de Física

Trabajo Fin de Grado

Método del Funcional de la Densidad para estructura electrónica de moléculas

Código del TFG: **FS24-031-FSC**

Tipo de TFG: **Trabajo teórico-práctico**

Autor: José Estepa Ruiz



15 de marzo de 2025 18:49

Índice general

Índice general	1
Índice de figuras	2
Índice de figuras	2
Índice de tablas	3
Índice de tablas	3
1. TEORIA	4
1.1. ¿Qué es el DFT?	4
1.1.1. Definición	4
1.1.2. Problema con la ecuación de Schrödinger	4
1.2. Aproximación de Thomas-Fermi	4
1.3. Teoremas de Hohenberg-Kohn	4
1.4. Ecuaciones de Kohn-Sham	4
1.5. Funcionales de la Densidad	4
2. SOFTWARE	5

Índice de figuras

Índice de tablas

CAPÍTULO 1

TEORIA

1.1. ¿QUÉ ES EL DFT?

aaaa

1.1.1. DEFINICIÓN

1.1.2. PROBLEMA CON LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER

1.2. APROXIMACIÓN DE THOMAS-FERMI

1.3. TEOREMAS DE HOOHENBERG-KOHN

1.4. ECUACIONES DE KOHN-SHAM

1.5. FUNCIONALES DE LA DENSIDAD

CAPÍTULO 2

SOFTWARE
