

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



16 de marzo de 2025 11:46

Índice general

Índice general	1
Índice de figuras	2
Índice de tablas	3
1. TEORIA	4
1.1. Aproximación de Thomas-Fermi	4
1.2. Teoremas de Hooenberg-Kohn	4
1.3. Ecuaciones de Kohn-Sham	4
1.4. Funcionales de la Densidad	4

Índice de figuras

Índice de tablas

CAPÍTULO 1

TEORIA

1.1. APROXIMACIÓN DE THOMAS-FERMI

1.2. TEOREMAS DE HOOHENBERG-KOHN

1.3. ECUACIONES DE KOHN-SHAM

1.4. FUNCIONALES DE LA DENSIDAD

a