

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 11:53

---

# Índice general

---

---

Índice general	1
Índice de figuras	2
Índice de tablas	3
<b>1. TEORIA</b>	<b>4</b>
1.1. ¿Qué es el DFT?	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

---

## Índice de figuras

---

---

## Índice de tablas

---

# CAPÍTULO 1

---

## TEORIA

---

---

### 1.1. ¿QUÉ ES EL DFT?

ssss aaa bbbb ccc

### 1.2. APROXIMACIÓN DE THOMAS-FERMI

Thomas Fermi Dirac y sus muertos

### 1.3. TEOREMAS DE HOOHENBERG-KOHN

### 1.4. ECUACIONES DE KOHN-SHAM

### 1.5. FUNCIONALES DE LA DENSIDAD