

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 11:51

Índice general

| | |
|-----------------------------------|----------|
| Índice general | 1 |
| Índice de figuras | 2 |
| Índice de tablas | 3 |
| 1. TEORIA | 4 |
| 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

1.3. TEOREMAS DE HOOHENBERG-KOHN

1.4. ECUACIONES DE KOHN-SHAM

1.5. FUNCIONALES DE LA DENSIDAD