

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 16:05

---

# 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
1.1.1. 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	5
1.5. Funcionales de la densidad	5

---

## Índice de figuras

---

---

## Índice de tablas

---

# CAPÍTULO 1

---

## TEORIA

---

---

### 1.1. ¿QUÉ ES EL DFT?

#### 1.1.1. DEFINICIÓN

**1.1.2. PROBLEMA CON LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER** Vamos a ponernos en la situación en la que nos gustaría describir las propiedades de una colección de átomos bien definidas, como podría ser un cristal o una molécula.

Una de las cosas fundamentales que nos gustaría conocer sobre esos átomos es su energías, y sobre todo como cambiaría ésta si movemos los átomos.

Tenemos que tener en cuenta que los núcleos son muchísimo más pesados que los electrones. De esta manera los electrones responden mucho más rápido a cambios en su entorno que los propios núcleos.

### 1.2. APROXIMACIÓN DE THOMAS-FERMI

Thomas Fermi Dirac y sus muertos

### 1.3. TEOREMAS DE HOOHENBERG-KOHN

Teoremas de Hoohenberg-Kohn

## 1.4. ECUACIONES DE KOHN-SHAM

Ecuaciones de Kohn-Sham

## 1.5. FUNCIONALES DE LA DENSIDAD

Funcionales de la densidad