

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 19:02

---

# Índice general

---

|  |          |
|--|----------|
| Índice general   | 1        |
| Índice de figuras  | 2        |
| Índice de figuras  | 2        |
| Índice de tablas   | 3        |
| 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 . . . . .                   | 4        |
| 1.5. Funcionales de la Densidad . . . . .                | 4        |
| <b>2. SOFTWARE</b>                                       | <b>5</b> |

---

## 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

---