

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 16:18

Índice general

Índice general	1
Índice de figuras	2
Índice de tablas	3
1. TEORIA	4
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	5
1.3. Teoremas de Hohenberg-Kohn	5
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 energía, 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.

Para ello primero resolvemos las ecuaciones que describen el movimiento de los electrones, para posiciones fijas de los núcleos atómicos. Para un conjunto de electrones encontramos su estado fundamental, de manera que por la aproximación de Born-Oppenheimer podemos considerar como problemas matemáticos distintos el de los electrones y el del núcleo.

Si tenemos M núcleos en las posiciones $\vec{\mathbf{R}}_1, \dots, \vec{\mathbf{R}}_M$, podemos expresar la energía fundamental del estado como función de la posición de estos núcleos: $E(\vec{\mathbf{R}}_1, \dots, \vec{\mathbf{R}}_M)$. Conociendo esta energía como la energía potencial adiabática de la superficie de los átomos.

1.2. APROXIMACIÓN DE THOMAS-FERMI

Thomas Fermi Dirac y sus muertos

1.3. TEOREMAS DE HOHENBERG-KOHN

Teoremas de Hohenberg-Kohn

1.4. ECUACIONES DE KOHN-SHAM

Ecuaciones de Kohn-Sham

1.5. FUNCIONALES DE LA DENSIDAD

Funcionales de la densidad