

CURSO ELECTIVO 2.SEMESTRE 2019
TEORIA DEL FUNCIONAL DE LA DENSIDAD

PROGRAMA

Introducción al método de Hartree--Fock y la Teoría de Muchos Cuerpos

Matrices de densidad, Operadores de densidad y Matrices de densidad reducidas.

Teoremas de Hohenberg y Kohn, v - y N - representabilidad, búsqueda restringida.

El potencial químico y su significado, discontinuidad del potencial químico

Modelo de Thomas--Fermi, Thomas--Fermi--Dirac, Thomas--Fermi--Dirac--von Weizsaecker

El Método de Kohn y Sham

Funcionales de la energía cinética y de la energía de intercambio y correlación.

Aplicaciones a la reactividad Química, electronegatividad, dureza, función de Fukui, ELF, AIM

Nuevos avances y tópicos

BIBLIOGRAFIA

R. G. Parr y W. Yang, Density Functional Theory of Atoms and Molecules, Oxford Press, 1989.

E. Kryaschko y E. Ludena, Density Functional Theory, 1990.

R. M. Dreizler y E. K. U. Gross, Density Functional Theory, Springer--Verlag, 1990

E. Engel and R. Dreizler, Density Functional Theory. An Advanced Course, Springer, 2010

R. M. Dreizler y J. da Providencia, Density Functional Methods in Physics, Plenum Press, 1985.

W. Koch y M. C. Hohlthausen, A chemist's guide to density functional theory, Wiley-VCH, 1999.

H. Eschrig, The Fundamentals of Density Functional Theory, 2003.

D. S. Sholl, J. A. Steckel, Density Functional Theory, Wiley, 2009

Profesores:

PATRICIO FUENTEALBA , CARLOS CARDENAS

El curso se realizará con 3h semanales de clases,
Tareas y un seminario al finalizar el curso.
La nota final será con la evaluación de las tareas más
seminario.