

FI-7006 TEORÍA DEL FUNCIONAL DE LA DENSIDAD

(Density Functional Theory)
Profesor: Patricio Fuentealba

15 U.D.

Requisitos: FI-3102 Física Moderna y FI-4001 Mecánica Cuántica

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.

Teoría del funcional de la densidad dependiente del tiempo (TDDFT) 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.