

Teoría del Funcional de la Densidad

Patricio Fuentealba

Programa

Introducción al modelo de partícula independiente. Hartree-Fock.

Matrices de densidad reducidas

Teoremas de Hohenberg y Kohn. V- y N- representabilidad .
Búsqueda restringida.

Modelos de Thomas Fermi y extensiones.

Método de Kohn y Sham.

Funcionales de intercambio y correlación.

Aplicaciones a reactividad química.

Teoría tiempo dependiente (TDDFT).

Estados Excitados.

Evaluación

Tareas y un seminario final.

Bibliografía

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. Hohlhausen, 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

Ferré, Filatov, Huix-Rotllant, Density Functional Methods for Excited States.

Apuntes del profe(2021)