

Teoría de funcionales de la densidad (214653)

Andrés Cedillo (AT-250)

Objetivo

Que el alumno:

Conozca, aplique e interprete los conceptos de la teoría de funcionales de la densidad y los criterios de reactividad química relacionados.

Temario

0. Revisión de mecánica cuántica (1)
1. Matrices de densidad reducidas (2)
2. Fundamentos (3)
3. Potencial químico (4)
4. Método de Kohn y Sham (7,8)
5. Derivadas del potencial químico y reactividad (5)
6. Modelo de Thomas y Fermi (6)

Bibliografía

Texto:

RG Parr & W Yang
Density Functional Theory of Atoms and Molecules
Oxford (1989)

Bibliografía complementaria:

S Lundqvist & NH March, *Theory of Inhomogeneous Electron Gas*, Plenum (1983)

EKU Gross & R Dreizler, *Density Functional Theory*, Springer (1993)

NH March, *Electron Density Theory of Many Electron Systems*, Academic (1991)

Evaluación

Los problemas se entregarán en la sesión siguiente y no se contabilizarán problemas atrasados. La calificación será el promedio de problemas correctos con respecto al total (aprox. 100).

Escala de calificaciones

MB: 87-100 B: 74-86 S: 60-73 NA: 0-59

Trimestre 03-P, grupo

Horario: Lu, Mi 9:30-11:45 AT-236
Asesoría: Ma, Ju 11:00-12:00 AT-250