



Cinvestav

## QUÍMICA TEÓRICA II

Doctorado en Ciencias Químicas

Cinvestav

Doctor Alberto Vela

19 de Febrero del 2008

### TEMARIO

#### Matrices de densidad reducidas.

- Definiciones básicas.
- Matrices de primero y segundo orden. Su relación con los valores esperados de operadores de uno y dos cuerpos.
- La energía total de un sistema electrónico como funcional de la matriz de densidad reducida de segundo orden.
- Función de correlación de pares y la densidad de intercambio-correlación.
- Matrices de densidad dentro de la aproximación de Hartree-Fock.

#### Teoremas de Hohenberg y Kohn

- $N$  y  $v$  representabilidad.
- Búsqueda restringida de Levy

#### Funcionales puros de la densidad.

- Thomas-Fermi.
- El término de Weizsacker. La no-uniformidad de la densidad electrónica.
- Intercambio del gas de electrones. Funcional de Dirac.
- Aplicaciones en átomos, moléculas y sólidos.

#### El método de Kohn-Sham. Conceptos básicos.

- El sistema de referencia. Energía cinética de Kohn-Sham.
- La densidad y los orbitales de Kohn-Sham.
- Potenciales efectivos a partir de una densidad. La teoría de Zhou, Parr y Morrison.
- Funcionales de intercambio-correlación.

- I. Locales
- II. Semilocales



Cinvestav

- III. No locales
- IV. Dependientes de la densidad de energía cinética
- V. Dependientes de orbitales

**El método de Kohn-Sham. Métodos LCGTO para resolver las ecuaciones de Kohn-Sham.**

**El método de Kohn-Sham. Aplicaciones atómicas, moleculares y en sistemas extendidos.**

**Teoría de funcionales de la densidad y la reactividad química. Índices de reactividad global, local y no-locales (kernels).**

#### **Bibliografía**

##### **BASICA**

- Density-functional theory of atoms and molecules / Robert G. Parr and Weitao Yang. New York : Oxford University Press ; Oxford, England : Clarendon Press, 1989.

##### **REFERENCIA**

- Density functional theory / edited by Eberhard K. U. Gross and Reiner M. Dreizler. New York : Plenum Press, 1995