



FACULTAD DE CIENCIAS

## CURSO DE POSTGRADO

<b>Nombre del curso</b>	Teoría del funcional de la densidad
<b>Tipo de curso</b> (Obligatorio, Electivo, Seminario)	electivo
<b>Nº de horas totales</b> (Presenciales + No presenciales)	243
<b>Nº de Créditos</b>	9
<b>Fecha de Inicio – Término</b>	
<b>Días / Horario</b>	
<b>Lugar donde se imparte</b>	Dpto. Física Fac. de Ciencias
<b>Profesor Coordinador del curso</b>	Carlos Cardenas y Patricio Fuentealba
<b>Profesores Colaboradores o Invitados</b>	
<b>Descripción del curso</b>	Es un curso teórico donde se verán los principios básicos de la teoría
<b>Objetivos</b>	Iniciar a los alumnos en uno de los métodos más usados para el cálculo de estructura electrónica
<b>Contenidos</b>	<p>Introducción al modelo de partícula independiente. Hartree-Fock.</p> <p>Matrices de densidad reducidas</p> <p>Teoremas de Hohenberg y Kohn. V- y N-representabilidad . Búsqueda restringida.</p> <p>Modelos de Thomas Fermi y extensiones. Método de Kohn y Sham.</p> <p>Funcionales de intercambio y correlación.</p>

	Aplicaciones a reactividad química. Teoría tiempo dependiente (TDDFT). Estados Excitados.
<b>Modalidad de evaluación</b>	Tareas y Seminarios
<b>Bibliografía</b>	<p>R. G. Parr y W. Yang, Density Functional Theory of Atoms and Molecules, Oxford Press, 1989.</p> <p>E. Kryaschko y E. Ludena, Density Functional Theory, 1990.  R. M. Dreizler y E. K. U. Gross, Density Functional Theory, Springer-Verlag, 1990.</p> <p>E. Engel and R. Dreizler, Density Functional Theory. An Advanced Course, Springer, 2010</p> <p>R. M. Dreizler y J. da Providencia, Density Functional Methods in Physics, Plenum Press, 1985.</p> <p>W. Koch y M. C. Hohlthausen, A chemist's guide to density functional theory, Wiley- VCH, 1999.</p> <p>H. Eschrig, The Fundamentals of Density Functional Theory, 2003.  D. S. Sholl, J. A. Steckel, Density Functional Theory, Wiley, 2009</p> <p>Ferré, Filatov, Huix-Rotllant, Density Functional Methods for Excited States.</p>