

**INTRODUCCIÓN A LA TEORÍA DEL FUNCIONAL DE DENSIDAD (2017-18)****DATOS GENERALES**

Código 35834

Créditos ECTS 3

**Departamentos y áreas**

Departamento	Área	Dpt. Resp.	Dpt. Acta
QUIMICA FISICA	QUIMICA FISICA	SÍ	SÍ

**Estudios en que se imparte**

MÁSTER UNIVERSITARIO EN CIENCIA DE MATERIALES

DOCTORADO EN CIENCIA DE MATERIALES

**Contexto de la asignatura**

La Teoría del Funcional Densidad se ha convertido en una de las herramientas de trabajo más utilizadas actualmente dentro de la Química Teórica y Computacional, independientemente del campo de aplicación de ésta, gracias a su capacidad predictiva a un coste computacional razonablemente moderado. Entre dichos campos de aplicación, se encuentran sin duda la ciencia de materiales, la química y física del estado sólido, la nanotecnología, la química orgánica y farmacéutica, etc.



## OBJETIVOS

### Objetivos específicos aportados por el profesorado (2017-18)

A destacar: (i) Conocer los fundamentos básicos de la Teoría del Funcional Densidad y sus avances más significativos; (ii) Ser capaz de identificar las limitaciones de la Teoría del Funcional Densidad en aplicaciones cuantitativas; y (iii) Disponer de la información necesaria para llevar a cabo experimentos computacionales por uno mismo.

## CONTENIDOS

### Contenidos teóricos y prácticos (2017-18)

#### **Unidad didáctica 1: Contextualización. Química cuántica. Métodos Ab initio.**

- Generalidades y propiedades básicas.
- Correlación electrónica. Energía de correlación.
- Teorías CI, perturbativas y CC.
- Precisión química y precisión de calibración.
- Jerarquía y convergencia de los resultados.
- Técnicas de extrapolación. Métodos compuestos.

#### **Unidad didáctica 2: Introducción a la Teoría del Funcional Densidad.**

- Teorías primitivas y perspectiva histórica: Modelo de Thomas-Fermi-Dirac.
- Generalidades matemáticas. Funcionales y derivadas funcionales.
- Matrices densidad reducidas: la densidad electrónica.
- Condiciones y garantías sobre la densidad electrónica.
- La derivada funcional de la energía.
- Teoremas de Hohenberg-Kohn: enunciado y demostración.

#### **Unidad didáctica 3: El modelo de Kohn-Sham.**

- Hipótesis básica y construcción del modelo.
- Autovalores y autoenergías resultantes del modelo.
- El funcional de intercambio-correlación: jerarquía y clasificación de expresiones.
- Funcionales explícitos de la densidad: LDA, GGA y m-GGA.
- El error de autointeracción.

#### **Unidad didáctica 4: La conexión adiabática.**

- El modelo de la conexión adiabática.
- Funcionales híbridos y doblemente híbridos.
- El potencial efectivo optimizado (OEP).

#### **Unidad didáctica 5: Reactividad química.**

- El potencial (molecular) químico.
- La ecuación fundamental del cambio químico.
- Índices de reactividad y funciones locales.

#### **Unidad didáctica 6: Limitaciones de modelos semilocales.**

- Interacciones no covalentes.
- Efectos estereoelectrónicos.
- Ruptura y formación de enlaces.
- Degeneraciones y cuasi-degeneraciones.
- Procesos de transferencia de carga.
- Deslocalización y conjugación electrónica.

#### **Unidad didáctica 7: Extensión a estados excitados (TD-DFT)**

- Teorema de Runge-Gross.
- Regimen de respuesta lineal.
- Energías de excitación.

#### **Unidad didáctica 8: Recursos y estrategias computacionales.**

- Capacidades computacionales actuales. Ejemplos.
- Revisión on-line de software científico disponible.
- Consideraciones numéricas.

#### **Unidad didáctica 9: Resultados y aplicaciones.**

- Propiedades geométricas y vibracionales.
- Propiedades energéticas y termoquímicas.
- Propiedades eléctricas.
- Propiedades fotoquímicas y fotofísicas.
- Efectos de agregación y ambientales.

#### **Unidad didáctica 10: Modulo de conocimiento individualizado**

Selección de temas a desarrollar y exponer por el alumnado. Entre ellos,

- Conceptos y reactividad química (potencial químico, principio HSAB, dureza, electronegatividad, etc.)
- Aplicación a metales de transición, superficies y fenómenos de adsorción.
- Aplicación a materiales funcionales: grafeno, semiconductores orgánicos, etc.
- Aplicación a sólidos periódicos y agregados moleculares.
- Técnicas de reducción del coste computacional: escalado lineal, técnicas RI, etc.
- Generalización de funcionales híbridos: híbridos locales, separaciones de corto y largo rango, etc.
- Funciones de base: convergencia, BSSE, desarrollos específicos, etc.

## EVALUACIÓN

### Instrumentos y criterios de Evaluación 2017-18

Tipo	Criterio	Descripción	Ponderación
EXAMEN FINAL	Se proporcionará al alumnado un supuesto práctico de acuerdo al programa de la asignatura y sus propios intereses.	Propuesta de supuesto práctico de tipo computacional (recuperable)	30
ACTIVIDADES DE EVALUACIÓN DURANTE EL SEMESTRE	Se evaluará, sobre todo, el interés y la participación, así como la capacidad de situar la asignatura en el contexto del Máster en Ciencia de Materiales	Participación activa (no recuperable)	10
ACTIVIDADES DE EVALUACIÓN DURANTE EL SEMESTRE	Se entregarán resueltos los problemas de la colección existente, que abarcan los contenidos desarrollados en la asignatura	Realización y entrega de problemas resueltos (recuperable)	30
ACTIVIDADES DE EVALUACIÓN DURANTE EL SEMESTRE	Se entregará un informe con los resultados y su discusión, para todas las prácticas computacionales realizadas	Realización y entrega de prácticas computacionales (no recuperable)	30