

## Índice

Resumen.....	iii
Abstract.....	iii
Índice.....	iv
<b>Capítulo 1. Introducción.....</b>	<b>1</b>
1.1 Referencias.....	7
<b>Capítulo 2. Resolución del problema electrónico(DFT).....</b>	<b>8</b>
2.1 Problema Principal.....	8
2.2 Resolución del problema electrónico.....	12
2.3 Teoría cuántica de muchos cuerpos: aproximaciones.....	12
2.4 Teoría de la Funcional Densidad (DFT).....	14
2.4.1 Defmición de Funcional y Derivada Funcional.....	16
2.4.2 Teorema de Hohenberg-Kohn.....	17
2.4.3 El método Kohn-Sham.....	20
2.5 Interpretación.....	24
2.6 Intercambio y correlación.....	25
2.7 Aproximación de Densidad Local (LDA).....	27
2.7.1 Características de la aproximación LDA.....	29
2.7.2 Limitaciones de LDA.....	29
2.8 Aproximación de los Gradientes Generalizados (GGA).....	30
2.9 Descripción del programa de cálculo electrónico.....	31
2.10 Referencias.....	32
<b>Capítulo 3. Modelo para el cálculo del camino de mínima energía clásico entre dos configuraciones de equilibrio.....</b>	<b>34</b>
3.1 Introducción.....	34
3.2 Características del método de <i>Nudged Elastic Band</i> (NEB).....	34
3.3 El método NEB.....	36
3.3.1 Análisis de los <i>kinks</i> .....	38
3.4 Nueva implementación del método NEB.....	39
3.5 Resultados.....	41
3.6 Referencias.....	44
<b>Capítulo 4. Resolución del problema nuclear.....</b>	<b>45</b>
4.1 Introducción.....	45
4.2 Cálculo de los modos normales en la posición de equilibrio clásica.....	46
4.3 Cálculo de los “modos normales” fuera de la posición de equilibrio clásica.....	<b>49</b>
4.4 El método de Vibrational Self-Consistent Field (VSCF)....	54
4.5 El método “NUESTRO-SCF”.....	58
4.6 Aproximaciones.....	59
4.7 Resultados.....	61
4.8 Reconstrucción de la molécula a partir de la función de onda nuclear.....	<b>69</b>

4.9 Apendice 1.....	72
4.10 Referencias.....	73

<b>Capítulo 5. Avances en el estudio del problema de <i>tunneling</i>.....</b>	<b>74</b>
5.1 Introducción.....	74
5.2 Modelo propuesto.....	77
5.3 Referencias.....	83

<b>Conclusiones Generales.....</b>	<b>84</b>
------------------------------------	-----------

<b>Agradecimientos.....</b>	<b>86</b>
-----------------------------	-----------