

Índice de contenidos

Índice de símbolos	ii
Índice de contenidos	iii
Índice de figuras	v
Resumen	vii
Abstract	viii
1. Teoría de Funcional Densidad	1
1.1. Introducción	1
1.2. Hamiltoniano de electrones interactuantes y correlaciones	2
1.3. Teoría de la funcional densidad	6
1.4. Esquema de Kohn-Sham (KS)	10
1.4.1. Ecuaciones de Kohn y Sham	11
1.5. Algunas aproximaciones a la energía de intercambio y correlación	13
2. Modelo de electrones correlacionados y potencial exacto de Kohn-Sham	14
2.1. Introducción	14
2.2. Límite de disociación	15
2.3. Solución analítica del modelo de electrones correlacionados para $N = 2$	17
2.4. Discusión del potencial exacto de KS en el límite de disociación.	20
2.5. Resultados	23
3. Potencial de intercambio y correlación para electrones correlacionados con un número fraccionario de partículas.	24
3.1. Introducción	24
3.2. Potencial de intercambio y correlación	26
3.2.1. Potencial exacto de KS	27
3.2.2. Potencial de Hartree, intercambio y correlación.	31

3.3. Conclusiones	36
4. Potencial exacto de KS para moléculas heterodiatómicas y con número fraccionario de partículas	37
4.1. Introducción	37
4.2. Modelo analítico para una molécula diatómica heteronuclear	38
4.3. Potencial exacto de Kohn-Sham para una molécula diatómica heteronuclear.	42
4.4. Análisis del potencial exacto de KS en el límite de disociación	43
4.5. Generalización para la molécula de Hidrógeno tridimensional.	47
4.6. Conclusiones.	48
5. Conclusiones generales y recomendaciones	51
A. Potencial de energía cinética	54
A.1. Potencial de KS para $1 < N \leq 2$	60
Bibliografía	61
Agradecimientos	64