

# Índice de contenidos

Índice de contenidos	v
Resumen	ix
Abstract	xi
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Importancia de la teoría de la funcional densidad	1
1.2. Limitaciones de DFT	1
1.3. Quantum ESPRESSO	2
1.4. Este trabajo	2
<b>2. Problema de la estructura electrónica del átomo</b>	<b>3</b>
2.1. Formulación del problema	3
2.1.1. Aproximación de Born-Oppenheimer	3
2.2. Método de Hartree-Fock.	4
2.2.1. Ecuaciones de Hartree-Fock	5
2.3. Teoría de la funcional densidad	7
2.3.1. Ecuaciones de Kohn-Sham	7
2.3.2. Aproximación de densidad local.	9
2.4. Implementación numérica del método de HF y DFT-LDA para átomos.	11
2.4.1. Solución de la ecuación de Schrödinger radial.	11
2.4.2. Cálculo del potencial de Hartree.	13
2.4.3. Solución de las ecuaciones de Hartree-Fock para el átomo de helio.	14
2.4.4. Solución de las ecuaciones de Kohn-Sham para el átomo de helio en la aproximación LDA.	17
2.4.5. Análisis comparativo de los resultados	18
<b>3. Método de ondas planas aumentadas</b>	<b>21</b>
3.1. Motivación	21
3.2. Estructura cristalina de los sólidos	22
3.2.1. Teorema de Bloch	22
3.3. Método de ondas planas aumentadas	24
3.3.1. Potencial de muffin-tin	24
3.3.2. Ecuación secular para la energía.	26
3.3.3. Energía de corte y dimensión de la base.	26
3.3.4. Solución de la ecuación secular	27
3.3.5. Procedimiento	29
3.4. Cálculo de la estructura de bandas del cobre.	29

3.5. Deficiencias del método . . . . .	34
<b>4. Cálculo en sistemas periódicos. Implementación usando ondas planas</b>	<b>37</b>
4.1. Introducción y definiciones básicas. . . . .	37
4.1.1. Descripción del sistema periódico . . . . .	37
4.1.2. Expansión en ondas planas . . . . .	38
4.1.3. Energía de corte y puntos $k$ . . . . .	39
4.1.4. Pseudopotenciales . . . . .	41
4.2. Cálculo de bandas del silicio con pseudopotenciales semiempíricos . . . . .	42
4.2.1. Pseudopotencial para el silicio . . . . .	43
4.2.2. Solución de la ecuación de Schrödinger . . . . .	44
4.2.3. Implementación numérica y diagrama de bandas. . . . .	45
4.3. Cálculo con pseudopotenciales . . . . .	46
4.3.1. Evaluación de la energía del sistema y tratamiento de la singularidad . . . . .	47
4.3.2. Pseudopotenciales gaussianos separables . . . . .	48
4.3.3. Cálculo autoconsistente con ondas planas . . . . .	50
4.4. Conclusiones . . . . .	52
<b>5. Potencial efectivo optimizado y la aproximación de KLI</b>	<b>53</b>
5.1. Teoría de la funcional densidad dependiente del espín . . . . .	53
5.2. Potencial efectivo optimizado e intercambio exacto . . . . .	54
5.2.1. Intercambio exacto (EXX) . . . . .	56
5.3. Aproximación de Krieger–Li–Iafrate . . . . .	56
5.3.1. Solución directa de la ecuación de KLI . . . . .	58
5.4. Conclusiones . . . . .	59
<b>6. Cálculo de sistemas atómicos usando intercambio exacto</b>	<b>61</b>
6.1. Breve descripción del programa <i>atomic</i> . . . . .	61
6.2. Potencial de KLI para sistemas atómicos . . . . .	62
6.3. Resultados y validación de la implementación . . . . .	66
6.3.1. Sistemas con número de partículas fraccionario . . . . .	68
6.3.2. Átomo de cloro con ocupación fraccionaria . . . . .	69
6.4. Conclusiones . . . . .	71
<b>7. Tratamiento del intercambio exacto usando ondas planas</b>	<b>73</b>
7.1. Energía de intercambio . . . . .	73
7.2. Cálculo del potencial de x-KLI en ondas planas . . . . .	74
7.2.1. Potencial de AFA . . . . .	75
7.3. Método iterativo para la obtención del potencial de KLI . . . . .	77
7.4. Validación de la implementación . . . . .	78
7.4.1. Sistemas finitos . . . . .	78
7.5. Conclusiones . . . . .	82
<b>8. Conclusiones</b>	<b>83</b>

---

<b>A. Programa de DFT para átomos</b>	<b>85</b>
A.1. Presentación y estructura . . . . .	85
A.2. Módulo <b>SOLVERS</b> . . . . .	85
A.3. Módulo <b>LSDA</b> . . . . .	88
A.4. Modulo <b>DFT</b> . . . . .	95
<b>B. Código del programa para el cálculo de la estructura de bandas del cobre usando el método de APW</b>	<b>105</b>
<b>C. Código del programa para el cálculo de la estructura de bandas del silicio usando el método EPM</b>	<b>117</b>
<b>D. Notas sobre el método de ondas planas aumentadas</b>	<b>123</b>
D.1. Determinación del potencial central . . . . .	123
D.2. Derivada logarítmica . . . . .	124
<b>Bibliografía</b>	<b>127</b>