

# Índice

|  |           |
|--|-----------|
| <b>Introducción</b>  | 1         |
| <b>1 Teoría</b>  | <b>1</b>  |
| 1.1 El teorema de Hohenberg-Kohn . . . . .   | 1         |
| 1.2 Esquema de Kohn-Sham . . . . .   | 3         |
| 1.3 Aproximación LDA . . . . .   | 7         |
| 1.4 Intercambio exacto . . . . .   | 8         |
| <b>2 Huecos de intercambio y correlación</b>   | <b>12</b> |
| 2.1 Definiciones y propiedades . . . . .   | 12        |
| 2.2 Aproximación LDA . . . . .   | 14        |
| 2.3 Hueco de intercambio exacto . . . . .  | 17        |
| 2.4 Cancelación de errores en LDA . . . . .  | 17        |
| <b>3 Descripción del sistema estudiado y modelo teórico</b>                                      | <b>19</b> |
| 3.1 Descripción del sistema . . . . .  | 19        |
| 3.2 Formulación teórica para un sistema cuasi-bidimensional . . . . .                            | 20        |
| 3.3 Comportamiento general del sistema . . . . .   | 24        |
| <b>4 Resultados y conclusiones</b>   | <b>33</b> |
| 4.1 Análisis de los huecos de intercambio . . . . .  | 33        |
| 4.2 Análisis comparativo de las energías de intercambio utilizando<br>distintos métodos. . . . . | 42        |
| 4.3 Conclusiones . . . . .   | 48        |