

**TITULO: Estudio de la evolución y aplicabilidad de los funcionales de la densidad en las últimas décadas.**

**COORDINADOR: ÁNGEL JOSÉ PÉREZ JIMÉNEZ**

**Resumen:**

La Teoría del Funcional Densidad (DFT) es una de las herramientas más utilizadas en la actualidad para el cálculo químico-cuántico de propiedades moleculares. Su éxito reside en la consideración más o menos precisa de las interacciones existentes en la materia, y su formulación matemática que nos permita describir la naturaleza y los materiales a nivel atómico y molecular. En las últimas décadas se han propuesto numerosas y muy variadas expresiones, lo que hace preciso un trabajo de recopilación y análisis, para intentar asociar su aplicación a los sistemas o problemas de interés fisicoquímico en que se esté interesado.

**Objetivos concretos:**

Realizar búsquedas bibliográficas y analizar publicaciones científicas.

Contextualizar adecuadamente modelos físicos y matemáticos, así como su interés fisicoquímico.

Ser capaz de realizar, presentar y defender trabajos científicos.

**Metodología a emplear:**

Trabajo personal y auto-aprendizaje tutorizado. Recomendación de materiales y fuentes de información. Revisión bibliográfica exhaustiva. Análisis de datos y obtención de conclusiones. Preparación de informes y memorias.

**Relación con asignaturas cursadas y/o itinerario relacionado:**

En orden de mayor a menor relevancia: Química Computacional (4o. curso), Química Cuántica y Espectroscopía (2o. curso), Química Física Avanzada (3er. curso), Ciencia de Materiales (4o. Curso).

**Bibliografía o fuentes de información:**

Koch, W., Holthausen, M. C.; A Chemist's guide to Density Functional Theory (Wiley-VCH, Weinheim, 2001).

Recursos bibliográficos electrónicos accesibles a través del SIBID.

**RECOMENDACIONES A UTILIZAR PARA LA ASIGNACIÓN DEL ALUMNO:**

Recomendable haber cursado, o estar haciéndolo, la optativa Química Computacional (4o. curso).