

La DFT tenía padre(s): Walter Kohn (1923-2016)

In memoriam

Entre la jerga de acrónimos que manejamos los químicos teóricos, de difícil comprensión para los no iniciados, hay uno que, hoy en día, no necesita aclaración entre el conjunto de la comunidad química: DFT (*Density Functional Theory*). ¿Qué químico no ha oído hablar, o no se ha tropezado con un artículo, en el que aparezcan estas siglas? La teoría del funcional de la densidad trasciende del ámbito de la química. En un reciente artículo de la revista *Nature*, que analizaba los 100 artículos más citados de la historia, en todos los ámbitos del conocimiento, 12 de ellos se relacionan con esta teoría, 2 de ellos en el top 10 (con más de 45.000 citas)¹. A pesar de haberse convertido en una técnica usual para entender la estructura electrónica de moléculas y materiales, la historia de su desarrollo, y de su relación con los conceptos fundacionales de la mecánica cuántica es aún desconocida para buena parte de sus utilizadores. Más desconocidos aún son los nombres de las personas que están detrás de su formulación. Si se pregunta a un químico/a por nombres de los padres de la mecánica cuántica, rápidamente aparecerán Bohr, Heisenberg y Schrödinger (como mínimo). Sin embargo, ¿cuántos podrían citar personajes de la misma relevancia en el desarrollo de la teoría del funcional de la densidad?

Valga esta reflexión para hacer llegar a toda la comunidad química española un hecho luctuoso: el pasado 19 de abril falleció, a la edad 93 años, Walter Kohn, recipiente del Premio Nobel de Química de 1998 (juntamente con John Pople) por “su desarrollo de la teoría del funcional de la densidad”. Kohn nació en Viena, en 1923, y sufrió en sus propias carnes el horror nazi. De familia judía, sus padres murieron en Auschwitz después de haber enviado a su hijo fuera del país, en una operación de rescate de niños judíos. Después de una serie de internamientos en campos de refugiados en Canadá, pudo empezar sus estudios en la Universidad de Toronto, donde se licenció



Walter Kohn

en matemáticas y física y obtuvo un máster en matemática aplicada. En 1948 se doctoró en física nuclear en la Universidad de Harvard, bajo la dirección del físico teórico Julian Schwinger (Premio Nobel de Física en 1965). Durante 1950-1960 fue profesor de la Carnegie Mellon University. Posteriormente, fue profesor durante 20 años (1960-1979) del departamento de física de la Universidad de California, San Diego (UCSD), hasta su nombramiento como primer director del Instituto Kavli de Física Teórica en la Universidad de California, Santa Bárbara, donde continuó dando clase como profesor emérito.

¹ Van Noorden, R.; Maher, B.; Nuzzo, R., “The top 100 papers”, *Nature* **2014**, 514, 550.

Para un sistema de n electrones, la teoría del funcional de la densidad permite reemplazar la complicada función de onda polielectrónica y la ecuación de Schrödinger asociada para su cálculo por la mucho más simple densidad electrónica y un también más simple esquema de cálculo. Aunque en su forma más rudimentaria (modelo Thomas-Fermi) fue propuesta en los años 20 del pasado siglo, muy en los principios de la mecánica cuántica, no fue hasta mediados de los años 60 cuando empezó a convertirse, en gran parte debido a los trabajos de Kohn, en la potente metodología de cálculo que es hoy². Kohn está detrás de dos desarrollos fundamentales de la DFT. En 1964, durante una estancia sabática en París, estableció, juntamente con Hohenberg, postdoc en la École Normale Supérieure, el teorema de Hohenberg-Kohn, piedra angular de la teoría, que establece que la densidad electrónica determina las propiedades de un sistema polielectrónico³. En 1965, en colaboración con otro postdoc (Sham) sentó las bases para la aplicación práctica de la teoría del funcional de la densidad al cálculo

de las propiedades de moléculas y materiales⁴. Ambos trabajos figuran en la relación de los 100 artículos más citados de todos los tiempos.

La metodología DFT presenta una importante ventaja práctica respecto los métodos basados en la función de onda: aportando igual (o superior) exactitud, el tiempo de cálculo que requiere aumenta mucho más moderadamente con el número de átomos del sistema. De esta manera, hoy en día son posibles cálculos cuánticos con centenares (y hasta miles) de átomos. Gracias a las aportaciones de Kohn y colaboradores, la DFT puede usarse para describir el movimiento de los electrones en todos los campos de la química, bioquímica, biología, nanosistemas y materiales. Walter Kohn se merece un lugar destacado en el recuerdo de los químicos.

AGUSTÍ LLEDÓS
Departament de Química
Universitat Autònoma de Barcelona

² Walter Kohn - Nobel Lecture: Electronic Structure of Matter – Wave Functions and Density Functionals”. *Nobelprize.org*. Nobel Media AB 2014. Web. 3 Jun 2016. http://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/1998/kohn-lecture.html

³ Hohenberg, P.; Kohn, W. *Phys. Rev. B* **1964**, *136*, B864.

⁴ Kohn, W.; Sham, L. J. *Phys. Rev.* **1965**, *140*, A1133.