

DEL GATO A LOS ELECTRONES: SCHRÖDINGER SE TOPA CON LA DFT

FROM CAT TO ELECTRONS: SCHRÖDINGER MEETS DFT

GONZÁLEZ MORENO, Fernanda
Itzel¹

BOUJNAH, Mourad²

MUSTRE DE LEÓN, José³

ESPINOSA FALLER, Francisco Javier⁴

CABALLERO BRIONES, Felipe¹

RESUMEN

Schrödinger trató de explicar los estados electrónicos encerrando hipotéticamente un gato en una caja. Entender el mundo invisible de los electrones es uno de los retos más grandes de la ciencia. Aunque no se pueden ver a los electrones directamente, como tampoco el gas dentro de un tanque, sus efectos lo determinan todo, desde la electricidad que alimenta los hogares hasta las reacciones químicas que suceden en el universo. La teoría del funcional de la densidad (DFT) surgió como una poderosa manera de estudiar estos actores invisibles concentrándose en una clave, la densidad electrónica. Este cambio conceptual, introducido por Hohenberg, Kohn y Sham transformó este campo, proporcionando un método práctico y cada vez más preciso para predecir el comportamiento de átomos, moléculas y materiales complejos. Actualmente, la DFT es el fundamento del diseño de materiales y la química teórica, habilitando a los científicos para poder explorar tecnologías propuestas incluso antes de que estas se lleven a la realidad. Sin embargo, algunos materiales prometedores pueden ser descartados prematuramente debido a las limitaciones inherentes de las aproximaciones utilizadas para el cálculo de sus propiedades. Esto ha motivado el desarrollo de nuevas herramientas, incluido el funcional de correlación de intercambio con la construcción de la estimación del valor de incertidumbre y estrategias modernas de validación basadas en active learning. Estos avances ayudan a validar predicciones, ofreciendo medidas de fiabilidad que hacen más fuerte y transparente el diseño computacional de materiales. Este artículo presenta una visión de la DFT, cómo trabaja, por qué se ha vuelto imprescindible, sus limitaciones y cómo algunos métodos emergentes pueden aproximar su incertidumbre para volver este método más confiable.

Palabras clave: DFT; métodos computacionales; Schrödinger; materiales avanzados.

1. Grupo GESMAT, Centro de Investigación en Ciencia Aplicada y Tecnología Avanzada, Instituto Politécnico Nacional. Altamira, Tamaulipas, México.

2. Centro Nacional de Proyección Térmica, CINVESTAV. Querétaro, Querétaro, México.

3. Departamento de Física Aplicada, CINVESTAV. Mérida, Yucatán, México.

4. Escuela de Ingeniería, Universidad Marista de Mérida. Mérida, Yucatán, México.

Correspondencia
fcaballero@ipn.mx
<https://orcid.org/0000-0003-4340-1050>
Fecha de recepción
24 de noviembre de 2025.
Fecha de aceptación
14 de mayo de 2026.

ABSTRACT

Schrödinger tried to explain electronic states by hypothetically enclosing a cat in a box. Understanding the invisible world of electrons is one of the biggest challenges in science. Although electrons cannot be seen directly, nor can the gas inside a tank, their effects determine everything from the electricity that powers homes to the chemical reactions that happen in the universe. The density functional theory (DFT) emerged as a powerful way to study these invisible actors by concentrating on one key, electron density. This conceptual shift, introduced by Hohenberg, Kohn, and Sham, transformed this field, providing a practical and increasingly accurate method for predicting the behavior of complex atoms, molecules, and materials. Today, DFT is the foundation of materials design and theoretical chemistry, enabling scientists to explore proposed technologies even before they are brought to reality. However, some promising materials may be discarded prematurely due to the inherent limitations of the approximations used for the calculation of their properties. This has motivated the development of new tools, including the exchange correlation functional with the construction of the uncertainty value estimation and modern validation strategies based on active learning. These advances help validate predictions, offering reliability measures that make the computational design of materials stronger and more transparent. This article presents an overview of DFT, how it works, why it has become essential, its limitations, and how some emerging methods can approximate its uncertainty to make this method more reliable.

Keywords: DFT; computational methods; Schrödinger; advanced materials.

INTRODUCCIÓN

Tras la formulación de la ecuación de Schrödinger en 1926, al describir los estados electrónicos usando al famoso gato, la ciencia ha buscado caminos para entender el comportamiento de los electrones y predecir las propiedades de los materiales. Físicos y químicos lo han intentado durante décadas: desde modelos estadísticos para estudiar la distribución de los electrones en un átomo como la teoría Thomas-Fermi, hasta técnicas más precisas como la Hartree-Fock buscando satisfacer el principio de exclusión de Pauli. Sin

embargo, el gran cambio llegó en los años setenta, cuando Hohenberg y Kohn demostraron que toda la información en un sistema cuántico puede ser descrita sólo con la densidad electrónica. Poco después, Kohn y Sham transformaron esa idea, que incluso los llevó a ganar el premio Nobel en Química, en una práctica herramienta, siendo así como nació la teoría del funcional de la densidad (Microsoft Research, 2025).

La DFT permite modelar los estados cuánticos de la materia, resultando en una gran solución a un problema tan complejo. Incluso al mismo Schrödinger le hubiese resultado más fácil resolver, en vez de pensar en encerrar a un gato en una caja radiactiva imaginaria para intentar dilucidar su estado vivo/muerto (Villars 1986).

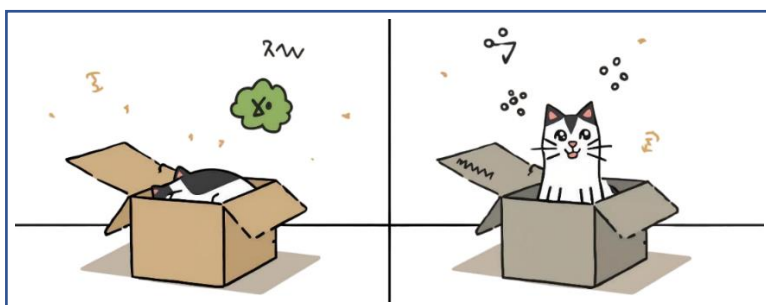


Figura 1. Imagen representativa de la paradoja del gato de Schrödinger.

Desde su nacimiento, la DFT ha evolucionado velozmente, primero con aproximaciones simples como la de la densidad local (LDA), después métodos refinados como las aproximaciones de gradiente generalizadas (GGA) y funcionales híbridos. Cada paso acerca a los científicos a cálculos más precisos sin depender de la función de onda desarrollada por Schrödinger, que es imposible de manejar para sistemas con muchos átomos (Nomura & Akashi, 2024). Ahora, casi un siglo después, hasta la inteligencia artificial se añade a esta historia, impulsando la DFT a una nueva era de velocidad y precisión.

PERO, ¿QUÉ ES LA DFT?

Imaginemos el tanque de gas LP que se usa para cocinar o calentar el agua en el boiler. Si no hay un manómetro, no se tiene certeza de que el gas se

encuentre dentro del tanque, ya que no se puede ver ni se puede abrir el tanque para ver si está ahí. Sin embargo, uno confía en que hay gas porque la estufa enciende y el agua se calienta, como sugiere la Figura 2. No se ve el gas, pero se sabe que existe por los efectos que produce. De esa forma sucede con los electrones, que son tan pequeños y se mueven a tanta velocidad que no se pueden observar directamente. Sin embargo, su comportamiento es lo que define todo lo que se conoce: desde cómo se genera la electricidad hasta cómo reaccionan las moléculas en los seres vivos.



Figura 2. Ilustración representativa del gas conectado a la estufa para

Es aquí donde la DFT aparece. Esta teoría es un camino más fácil y efectivo que permite poder estudiar el mundo cuántico sin tener que resolver ecuaciones imposibles, como la de Schrödinger para muchos átomos, y sin recurrir a representaciones conceptuales complejas asociadas con la mecánica cuántica. Así, en lugar de estudiar cada electrón individualmente, cosa que aún representa un reto computacional, la DFT se enfoca en estudiar dónde es más probable encontrar un electrón, es decir, en la densidad electrónica, que se representa en la Figura 3. Construyendo una estructura que puede ser un cúmulo atómico, una molécula o un cristal, lo que sigue es modelar la densidad electrónica y a partir de ahí, todo lo demás.

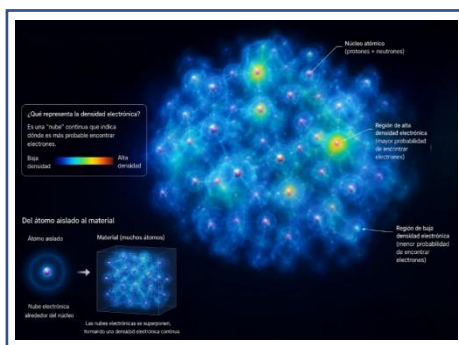


Figura 3. Imagen representativa de la densidad electrónica de un material.

En otras palabras, la DFT es una técnica que permite simular el comportamiento de un material en estudio y simular sus propiedades

electrónicas, ópticas, estructurales, térmicas, entre otras, basándose en el manejo de la densidad electrónica (Nikšić y col., 2011).

La DFT es una de las técnicas *ab initio*, o sea, las que parten de los primeros principios que explican las interacciones entre los electrones en los átomos, moléculas o materiales. Aunque las bases matemáticas de la DFT son complejas, tienen un propósito muy directo: permitir la predicción de las propiedades de un material sin haberlo fabricado antes. Desde la década de los años setenta la DFT ha sido utilizada en física del estado sólido, sin embargo, fue hasta los noventa cuando alcanzó la precisión necesaria para volverse una herramienta sumamente útil en la química y ciencia de los materiales. Su mayor ventaja es el equilibrio entre el costo computacional y la precisión, ofreciendo resultados muy confiables sin requerir grandes recursos, tanto materiales como económicos, que demandan los procedimientos experimentales tradicionales y los métodos de resolución de las ecuaciones cuánticas tradicionales.

La DFT no es una sola técnica sino un conjunto de metodologías que se adapta a distintos tipos de sistemas. Funciona muy bien con moléculas orgánicas y compuestos sencillos, pero también con sistemas más complejos como metales, catalizadores, películas delgadas, o sistemas electroquímicos (Ismail y col., 2024).

ENTONCES, ¿QUÉ SE PUEDE DESCUBRIR USANDO DFT?

Gracias a la DFT, es posible estudiar grandes moléculas, materiales avanzados, semiconductores para fotocatalisis y producción de hidrógeno, complejos metálicos, entre muchas cosas más (van Mourik y col., 2014). Permite traducir la conducta de un conjunto de electrones en información útil que permite crear nuevos materiales, entender reacciones químicas y diseñar nuevas tecnologías. Con esta herramienta es posible responder preguntas como: ¿cómo se organiza la nube electrónica en un material? ¿qué geometría adoptará una molécula? ¿qué tan estable es un estado magnético? ¿cómo fluye la carga o el espín? ¿cuánta energía necesita una reacción química para ocurrir? ¡una amplia variedad de fenómenos! Ofrece también técnicas

adicionales que ayudan a representar sistemas reales como calcular el spin polarizado, modelos de campo electrostático, métodos para emular ambientes extendidos y acoplamiento con regiones cuánticas más pequeñas cuando un material es muy grande para ser simulado completamente (Noodleman y col., 2003). La DFT no solo aplica para estados fundamentales, estáticos, sino que usando variantes como la DFT dependiente del tiempo (TDDFT), es posible estudiar propiedades electrónicas excitadas, relevantes para la fotónica, sensores y materiales optoelectrónicos.

Actualmente los programas disponibles para trabajar con DFT se han vuelto tan potentes que es posible guiar a los usuarios a cálculos complejos solo con aplicar algunos comandos sin necesidad de entender completamente las ecuaciones avanzadas (cómo la de Schrödinger) e incluso existen ya interfases gráficas que permiten prescindir de los comandos ofreciendo entornos más amigables con el usuario.

¿SE PUEDE CONFIAR EN LA DFT PARA CREAR TECNOLOGÍAS QUE AÚN SON IDEAS?

Si, se puede confiar en la DFT, pero solo entendiendo sus limitaciones y aprendiendo cómo medir la incertidumbre en los resultados que ofrece.

La DFT, en especial en su forma más común (GGA), se utiliza de forma cotidiana para descubrir materiales mediante grandes búsquedas que eliminan técnicas poco prometedoras y conservan sólo aquellos que presentan mejores resultados para estudiarlos con mayor profundidad. En esa primera etapa la DFT funciona muy bien y presenta resultados muy confiables. No obstante, aparece un problema de gran importancia: aunque la DFT casi nunca se equivoca ayudando a descartar las malas propuestas, a veces también descarta por error las buenas debido a la incertidumbre en sus predicciones. Entonces, si se quiere diseñar tecnologías que aún son sólo ideas, esa incertidumbre importa muchísimo.

Es por eso por lo que han surgido funcionales como BEEF-vdW que estiman automáticamente su propia incertidumbre. Esto permite saber la confiabilidad de la predicción, en lugar de tomar el resultado como una verdad absoluta. Este enfoque se ha usado, por ejemplo, para estimar la incertidumbre del estado magnético fundamental de diversos materiales, y para calcular un

indicador denominado c-value, que mide el nivel de confianza de una predicción (Houchins & Viswanathan, 2017). Sin ese dato, cualquier afirmación sobre datos magnéticos obtenida en DFT por medio del funcional GGA queda incompleta. Pero la comunidad científica ha identificado otro reto...

¿CÓMO SE PUEDE VALIDAR QUE LOS FUNCIONALES DE DFT REALMENTE FUNCIONAN?

Para generar resultados, DFT suele utilizar bases de datos de referencia, también llamados benchmark sets, pero muchas de ellas se han elaborado con poco rigor, o con sesgos que limitan su utilidad para espacios más amplios de materiales o reacciones químicas.

Para remediar esto, una investigación reciente ha propuesto una solución basada en *active learning* (Alfonso-Ramos y col., 2025), que toma un conjunto de referencia iniciales, denominado BH9, para construir un espacio químico más amplio de reacciones. Entrenando un modelo capaz de predecir la divergencia que existe en veinte diferentes funciones de DFT, se exploró completamente el espacio químico y fueron seleccionadas automáticamente las reacciones más desafiantes, es decir, aquellas donde los funcionales presentan una mayor diferencia. Los autores descubrieron que la relación entre la estructura molecular y la divergencia funcional es altamente asimilable, y utilizando menos de cien reacciones nuevas, lograron construir un conjunto de validación con mayor representatividad y exigencia que, incluso, modifica las conclusiones sobre el rendimiento real de diversos funcionales respecto al conjunto original.

Se puede confiar en la DFT para la exploración de tecnologías inexistentes, siempre y cuando las predicciones se acompañen de una evaluación rigurosa del valor de incertidumbre con validaciones bien construidas. Además, al incorporar criterios como el c-value, funcionales con estimación de error y conjuntos de validación creados mediante *active learning*, la DFT se vuelve más confiable, robusta y predictiva, lo que incrementa de forma considerable la probabilidad de identificar materiales y reacciones realmente prometedoras antes de invertir tiempo y recursos en investigación experimental.

CONCLUSIÓN

La DFT o teoría del funcional de la densidad desarrollada por Hohenberg, Kohn y Sham, nació para ofrecer una manera inteligente y computacionalmente asequible para describir el comportamiento de los electrones presentes en toda la materia, que a su vez determinan los fenómenos eléctricos, magnéticos, u ópticos que se observan cotidianamente. La DFT es el puente que permite entender lo que se observa con lo que es complicado de resolver, como la ecuación de Schrödinger para muchos átomos.

Actualmente la DFT se ha convertido en una herramienta indispensable para el diseño de materiales y tecnologías que aún no existen. Sin embargo, no es infalible: aunque descarta rápidamente malas ideas, a veces también resulta contraproducente cuando descarta tecnologías realmente promete-doras. Por ello surgieron funcionales y técnicas de validación que permiten medir la fiabilidad de los cálculos, corregir errores y mejorar la capacidad de predecir correctamente, incluso en sistemas complejos, el error de cálculo, para avanzar hacia la elaboración de materiales más eficientes e inteligentes que, por el momento, solo existen en simulaciones.

La DFT no solo ayuda a estudiar lo invisible, también enseña que, incluso en la ciencia, la certeza no es absoluta, y que la claridad en el cálculo de la incertidumbre es lo que permite construir con mayor precisión el mundo del futuro.

AGRADECIMIENTOS

Este trabajo fue apoyado por el Proyecto 202503050N del Laboratorio Nacional de Supercómputo del Sureste de México, el proyecto SIP-IPN 2026-0774 y el proyecto SIP de innovación de alumnos del Instituto Politécnico Nacional 2025-A047.

REFERENCIAS

- Alfonso-Ramos, J. E., Adamo, C., Brémond, É. & Stuyver, T. (2025). Improving the reliability of, and confidence in, DFT functional benchmarking through active learning. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 21(4): 1752–1761. DOI: 10.1021/acs.jctc.4c01729.
- Houchins, G. & Viswanathan, V. (2017). Quantifying confidence in density functional theory predictions of magnetic ground states. *Physical Review B*, 96(13). DOI: 10.1103/PhysRevB.96.134426.
- Ismail, F. M. D., Nahar, L. & Sarker, S. D. (2024). Prediction of structure based on spectral data using computational techniques. In *Computational Phytochemistry* (pp. 255–300). Elsevier.
- Microsoft Research. Timeline: The continuing evolution of density functional theory. (2025). [En línea]. Disponible en: <https://www.microsoft.com/en-us/research/articles/timeline-the-continuing-evolution-of-density-functional-theory/>. Fecha de consulta: 11 de mayo de 2026.
- Nikšić, T., Vretenar, D. & Ring, P. (2011). Relativistic nuclear energy density functionals: Mean-field and beyond. *Progress in Particle and Nuclear Physics*, 66(3): 519–548. DOI: 10.1016/j.ppnp.2011.01.055.
- Nomura, Y. & Akashi, R. (2024). Density functional theory. In *Encyclopedia of Condensed Matter Physics* (pp. 867–878). Elsevier.
- Noodleman, L., Lovell, T., Han, W.-G., Liu, T., Torres, R. A. & Himo, F. (2003). Density functional theory. In *Comprehensive Coordination Chemistry II* (pp. 491–510). Elsevier.
- Van Mourik, T., Bühl, M. & Gageot, M.-P. (2014). Density functional theory across chemistry, physics and biology. *Philosophical Transactions. Series A, Mathematical, Physical, and Engineering Sciences*, 372(2011): 20120488. DOI: 10.1098/rsta.2012.0488.
- Villars, C. N. (1986). The paradox of Schrodinger's cat. *Physics Education*, 21(4): 232–237. DOI: 10.1088/0031-9120/21/4/007.