

Conceptual Density Functional Theory is a chemical reactivity theory rooted in Density Functional Theory. It introduces reactivity indices, defined as (functional) derivatives of the electronic energy functional, which can provide insight into the reactivity of a system. We focus on one of those indices, specifically the linear response kernel, which provides a measure of the response of the electronic density to changes in the external potential. We evaluate and visualize this function throughout the periodic table in order to capture the trends that are contained in this function. The relation between the linear response function and the (local) polarizability as well as the extension of the linear response function to the time-dependent domain are also investigated.

Conceptuele Dichtheidsfunctionaaltheorie is een chemische reactiviteitstheorie die zijn oorsprong vindt in Dichtheidsfunctionaaltheorie. Het introduceert reactiviteits indices, gedefinieerd als (functionele) afgeleiden van de elektronische energie, die inzicht kunnen verschaffen in de reactiviteit van een systeem. We focussen op een van dergelijke indices, namelijk de lineaire respons kernel, die een maat verschaft voor het antwoord van de elektronische dichtheid op veranderingen in de externe potentiaal. We evalueren en visualiseren deze functie doorheen de periodieke tabel om zodoende de trends die door deze functie kunnen worden blootgelegd vast te stellen. De relatie tussen de lineaire respons functie en de (lokale) polariseerbaarheid zowel als een uitbreiding van de lineaire respons functie naar het tijdsafhankelijk domein zijn ook onderzocht.