

Sistemas quânticos unidimensionais: laboratórios para o desenvolvimento da Teoria do Funcional da Densidade

Daniel Vieira¹, Mateus Bazan Peters Querne²

Palavras-chave: teoria do funcional da densidade, átomos unidimensionais, correções de auto-interação.

A Teoria do Funcional da Densidade (DFT) se tornou uma das principais ferramentas modernas para o cálculo da estrutura eletrônica da matéria. Formalmente exata a partir dos teoremas originais, o sucesso de aplicações DFT depende de aproximações precisas para o funcional de troca e correlação (XC), em conjunto com estratégias de implementação computacionalmente viáveis. Nesse contexto, propomos aqui a utilização de sistemas quânticos unidimensionais (1D) como laboratórios teóricos, mais simples de se implementar e que ainda podem fornecer importantes pistas para uma descrição mais precisa de sistemas tridimensionais. Especificamente, aplicamos uma aproximação local da densidade dependente de spin (LSDA) a modelos de átomos unidimensionais. Como essa LSDA é incorreta para sistemas monoelétrônicos, ou seja, sofre de um erro de auto-interação, incluímos a correção de auto-interação ADSIC, mantida como um funcional explícito da densidade via ideia de densidade orbital média. Consideramos átomos neutros com $1 \leq Z \leq 4$ e seus íons positivos, determinando os valores de energias totais, potenciais de ionização, distribuições de densidade e potenciais XC, em todos os casos, comparados com valores exatos. Encontramos que a abordagem ADSIC tende a reduzir fortemente os erros apresentados pela LSDA, sobretudo em se tratando dos potenciais de ionização obtidos via autovalores Kohn-Sham mais altamente ocupados (ϵ_{HO}). Por fim, sabendo que o funcional ADSIC é inconsistente em tamanho, expomos perspectivas para um trabalho futuro direcionado a moléculas unidimensionais.

¹ Orientador, Professor do Departamento de Física do CCT – UDESC – danielv@joinville.udesc.br

² Acadêmico do Curso de Licenciatura em Física do CCT – UDESC, bolsista de iniciação científica PIVIC/UDESC.