

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

Daniel Vieira¹, Mateus Bazan Peters Querne²

Palavras-chave: teoria do funcional da densidade, correções de auto-interação, dissociação molecular.

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, em conjunto com estratégias de implementação computacionalmente viáveis. Nesse contexto, propomos aqui a utilização de sistemas quânticos unidimensionais 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. 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 de Kohn-Sham mais altamente ocupados. Apesar disso, o funcional ADSIC é caracterizado pela inconsistência em tamanho, levando a resultados indesejáveis em processos como os de dissociação molecular. Por essa razão, expomos também uma abordagem que visa contornar a inconsistência da ADSIC, estendendo a análise a moléculas unidimensionais.

¹ Orientador, Professor do Departamento de Física do CCT-UDESC – daniel.vieira@udesc.br.

² Acadêmico(a) do Curso de Licenciatura em Física do CCT-UDESC, bolsista de iniciação científica PROBIC/UDESC.