

INTRODUÇÃO AO FORMALISMO DA TEORIA DO FUNCIONAL DA DENSIDADE

Daniel Felipe Meurer¹, Daniel Vieira²

¹ Acadêmico do Curso de Licenciatura em Física do CCT/UDESC - bolsista PROBIC/UDESC

² Orientador, Departamento de Física, CCT/UDESC – daniel.vieira@udesc.br.

Palavras-chave: Teoria do Funcional da Densidade. Equações de Kohn-Sham. Aproximação Local da Densidade.

A Teoria do Funcional da Densidade (DFT) [1] tem se tornado cada vez mais utilizada para descrever a estrutura eletrônica da matéria, sendo mais viável do que a direta aplicação da equação de Schrödinger (sobretudo, por ter um custo computacional consideravelmente mais baixo). A maneira mais comum de se implementar a DFT se dá através das equações de Kohn-Sham (KS), que são um conjunto de equações tratadas numericamente de modo auto consistente, levando em conta as contribuições de troca e correlação eletrônica, que são os responsáveis por incorporar os efeitos de interação em sistemas com muitos elétrons. Em princípio exato, o formalismo KS da DFT necessita de aproximações para os funcionais de troca e correlação. A estratégia mais simples possível é a aproximação local da densidade (LDA).

Nesse contexto, em se tratando do primeiro ano e de um estudante ainda no início do curso de graduação, que não teve contato com disciplinas de física moderna, o objetivo deste projeto de iniciação científica consistiu em introduzir o estudante ao formalismo da DFT, estudando os fundamentos e conduzindo as primeiras implementações numéricas aplicadas a sistemas quânticos de muitos elétrons. Durante os seis primeiros meses, o acadêmico estudou o formalismo da DFT, incluindo o seu desenvolvimento histórico e estratégias de implementação (que não se limita à utilização das equações de KS). Nos seis meses seguintes, o bolsista passou à implementação numérica de códigos DFT simples, em linguagem Fortran, particularmente aplicados a sistemas modelos unidimensionais (1D), como poços e átomos com muitos elétrons.

Utilizando um potencial do tipo soft-Coulomb para as interações de troca, correlação e potencial externo, além de uma LDA especificamente construída para esse caso, o bolsista comparou valores de energias obtidas a partir do seu próprio código numérico com os já conhecidos na literatura [2], obtendo resultados condizentes. Especificamente, foram abordados os átomos de He, Be, Be²⁺ e Li⁺. Além disso, foram obtidos perfis de densidade para alguns modelos de átomos unidimensionais, conforme exposto nas Figuras 1 e 2, em que apresentamos curvas de densidade, potencial externo e potencial Kohn-Sham para os átomos de Hélio e Berílio 1D, respectivamente. Todas as curvas estão de acordo com o que também já é conhecido na literatura [3].

Uma vez cumpridos os objetivos do primeiro ano de atividades, como perspectiva de prosseguimento do trabalho, vislumbramos a utilização de funcionais orbitais da densidade, cuja implementação requer a utilização de técnicas mais elaboradas e que demandam um custo computacional severamente maior. Especificamente, almejamos construir estratégias de simplificação numérica, a fim de tornar possível a aplicação a sistemas eletrônicos mais complexos.

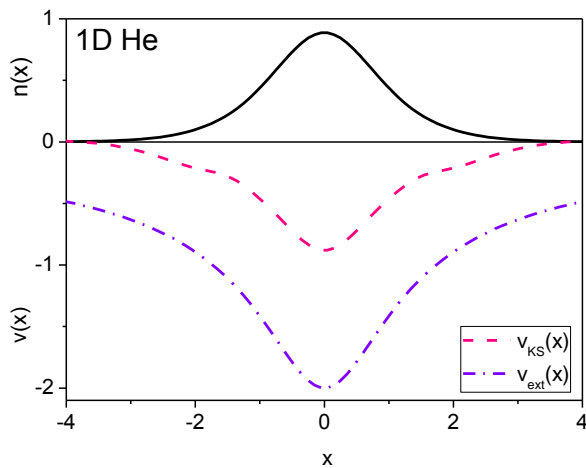


Fig. 1: Curvas de densidade, potencial Kohn-Sham e potencial externo para um átomo de Hélio 1D.

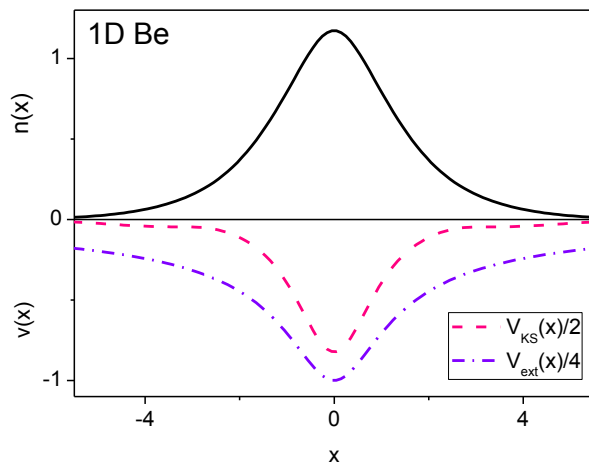


Fig. 2: As mesmas curvas anteriormente citadas, agora para um átomo de Berílio 1D.

Referências:

- [1] KOHN, W.. Nobel Lecture: Electronic structure of matter—wave functions and density functionals. **Reviews Of Modern Physics**, [s.l.], v. 71, n. 5, p.1253-1266, 1 out. 1999. American Physical Society (APS). <http://dx.doi.org/10.1103/revmodphys.71.1253>.
- [2] HELBIG, N. et al. Density functional theory beyond the linear regime: Validating an adiabatic local density approximation. **Phys. Rev. A**, [s.l.], v. 83, n. 3, p. 1-5, 14 mar. 2011. American Physical Society (APS). <http://dx.doi.org/10.1103/physreva.83.032503>.
- [3] WAGNER, Lucas O. et al. Reference electronic structure calculations in one dimension. **Phys. Chem. Chem. Phys.**, [s.l.], v. 14, n. 24, p.8581-8590, 2012. Royal Society of Chemistry (RSC). <http://dx.doi.org/10.1039/c2cp24118h>.