

TEORIA DO FUNCIONAL DA DENSIDADE - NANOCIÊNCIAS EM UMA ABORDAGEM TEÓRICA.

NASCIMENTO, R.

Pós-doutoranda - Programa de Pós-Graduação em Ciências Física de Materiais, Universidade Federal de Ouro Preto, Ouro Preto, MG;

nascire@gmail.com

RESUMO

Muito esforço tem sido empregado na pesquisa científica o que resultou nos avanços na ciências e na tecnologia. Esses avanços proporcionaram a obtenção de equipamentos sofisticados com a capacidade de caracterizar e sintetizar amostras com excelente precisão, e, alcançando escalas tão pequenas jamais atingidas antes. Aliado às técnicas experimentais, encontra-se o estudo teórico dos materiais, que também tem um papel muito importante nos avanços na nanociências. Em muitos casos, a investigação teórica é decisiva na interpretação das propriedades apresentadas pela amostra, podendo até mesmo, ser considerado como um guia nos experimentos para a observação ou interpretação de novos fenômenos. A abordagem teórica dos materiais necessita de uma metodologia que possa descrever o sistema e suas propriedades de forma tão realista quanto possível. O primeiro passo é escrever o hamiltoniano do sistema e então diagonalizá-lo. Este procedimento pode ter um grande custo computacional. Por isso, o cálculo e diagonalização do hamiltoniano do sistema real é muitas vezes substituído por outras metodologias para que o custo computacional seja o mínimo, sem perder a confiabilidade dos resultados desejados. Neste sentido, um método teórico que se destaca no estudo das propriedades dos materiais é a Teoria do Funcional da Densidade (DFT). A DFT conduz a uma enorme simplificação da solução do problema real (sistema de muitos corpos), pois, ao em vez de utilizar a função de onda de um sistema de N elétrons ela faz uso da densidade eletrônica do sistema, a qual possui apenas três variáveis. O interessante é que todas as propriedades físicas de um sistema podem ser, em princípio, determinadas com apenas o conhecimento da densidade eletrônica do estado fundamental. Devido à DFT ser uma teoria exata e fazer uso de algumas aproximações para solucionar o problema de forma prática, em sua grande maioria, os estudos realizados com a DFT são bem sucedidos. Neste seminário iremos apresentar de forma sucinta a teoria do funcional da densidade juntamente com alguns dos seus resultados obtidos para materiais bidimensionais, os quais corroboram com resultados experimentais.