

FUNCIONAIS ORBITAIS NA TEORIA DO FUNCIONAL DA DENSIDADE

Daniel Felipe Meurer¹, Daniel Vieira²

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

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

Palavras-chave: Teoria do Funcional da Densidade. Funcionais Orbitais. Potencial Efetivo Otimizado.

A Teoria do Funcional da Densidade (DFT) tem vasta aplicação em cálculos de estrutura eletrônica de átomos, moléculas e sólidos. Apesar de formalmente exata, a DFT depende de boas aproximações para o chamado funcional de troca e correlação, e, nesse sentido, tanto no quesito de precisão em relação a resultados experimentais como em termos de eficiência de implementação computacional.

Neste trabalho, focamos na eficiência de implementação de funcionais orbitais da densidade, que são aqueles que dependem apenas implicitamente da densidade, sendo necessária a utilização do chamado método do potencial efetivo otimizado (OEP), conhecido pelo elevado custo computacional. A fim de contornar a utilização do OEP, consideramos algumas aproximações disponíveis na literatura, tais como: o KLI, uma das primeiras e com esse nome devido a seus formuladores (Krieger, Li, Iafrate), a aproximação de Slater, a aproximação por média global (GAM) e, por fim, duas autoconsistências escalonadas (LSSC e GSSC) [1].

Os sistemas investigados são modelos de átomos e moléculas diatômicas unidimensionais (1D), cujas interações elétron-elétron e elétron-núcleo são modeladas por potenciais do tipo *Coulombiano* suavizado (Soft-Coulomb), dados por:

$$v_{int}(x_i, x_k) = \frac{q_j q_k}{\sqrt{\alpha^2 + (x_j - x_k)^2}} \quad v_{ext}(x_j, X_i) = \sum_{i=1}^2 \frac{Z_i q_j}{\sqrt{\alpha^2 + (x_j - X_i)^2}}$$

em que x_j e x_k representam as posições dos elétrons, enquanto que X_i representam as posições dos núcleos. Convém destacar a dependência com o chamado parâmetro de suavização, α . Também, é importante frisar que foram utilizadas unidades atômicas, de modo que $Z = q = 1$.

Em especial, consideramos a molécula de Li_2 , analisando as curvas de densidade em função do parâmetro de suavização α . Os resultados foram bastante satisfatórios, uma vez que obtivemos curvas de densidade próximas às obtidas via OEP, com um custo computacional consideravelmente menor. Por exemplo, para $\alpha = 2$ e uma separação nuclear $d = X_2 - X_1 = 5$, apresentamos curvas de densidade na Figura 1 e um comparativo de tempo de processamento na Tabela 1.

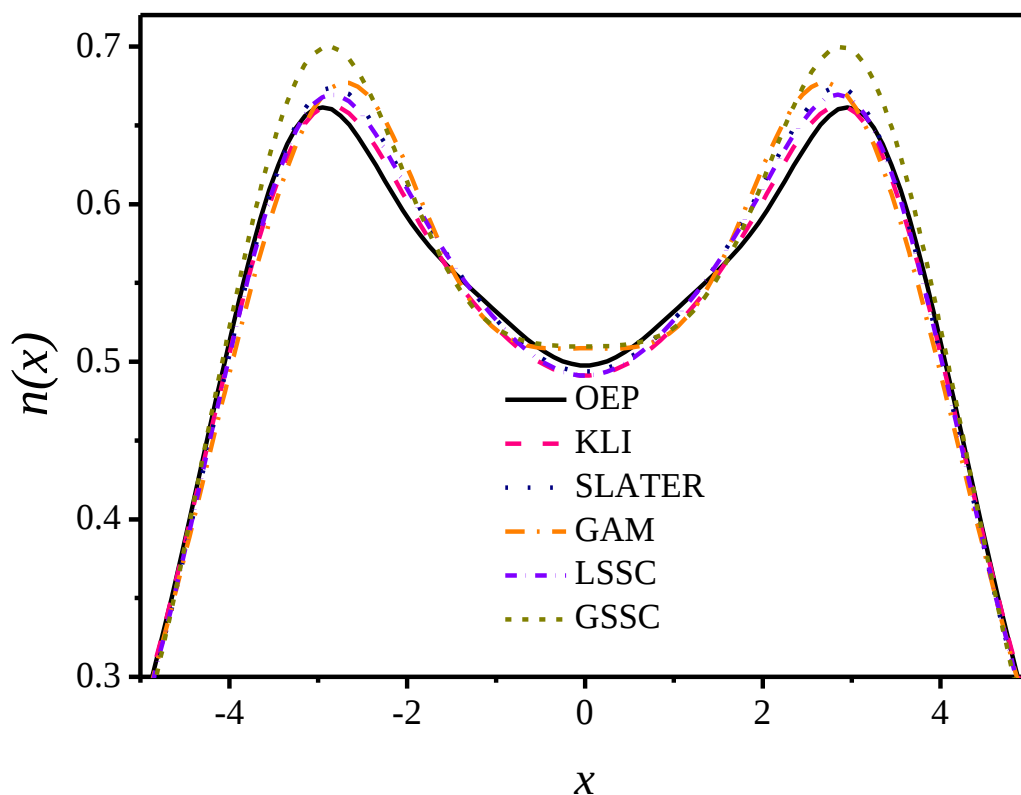


Fig. 1: Curvas de densidade para uma molécula Li_2 unidimensional, considerando um parâmetro de suavização $\alpha=2$ e separação nuclear $d=5$.

Implementação	Tempo (s)
OEP	9821
KLI	28
Slater	26
GAM	25
LSSC	35
GSSC	37

Tabela 1: Tempo de implementação para uma molécula de Li_2 , considerando um parâmetro de suavização $\alpha=2$ e separação nuclear $d=5$.

Referências:

[1] BENTO, Marsal Eduardo. **Funcionais Orbitais: Investigação de Estratégias de Implementação no Contexto da Formulação Kohn-Sham da Teoria do Funcional da Densidade**. 2014. 71 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Física, Universidade do Estado de Santa Catarina, Joinville, 2014.