

TEORIA FUNCIONAL DA DENSIDADE

FÁBIO CALCAGNO RIEMKE¹; Msc EFRÁCIO MAMANI²; Dr. SÉRGIO DA SILVA
CAVA³; MÁRIO LUCIO MOREIRA⁴

¹*Universidade Federal de Pelotas – fabio.riemke@gmail.com*

²*Universidade Federal de Pelotas – efracio01@gmail.com*

³*Universidade Federal de Pelotas– sergiocava@gmail.com*

⁴*Universidade Federal de Pelotas– mlucio3001@gmail.com*

1. INTRODUÇÃO

A física quântica revolucionou a maneira de se entender o mundo. Iniciou-se com a explicação do efeito fotoelétrico por Albert Einstein, em 1905, identificando que a luz era composta de partículas individuais chamadas fôtons.

Luis de Broglie, Werner Heisemberg e Erwing Shrodinger, dentre outros, desenvolveram a base conceitual para que as propriedades dos materiais pudessem ser calculadas e determinadas em escala atômica, em que as leis da mecânica clássica não se aplicam.

Este trabalho apresentará diversas evoluções matemáticas para o cálculo dos níveis energéticos eletrônicos.

Ainda que os elétrons tenham as mesmas características compostionais, vão se comportar de maneira diferente, dependendo da forma como se movem no espaço, muito embora o caráter particulado seja parâmetro de entrada das equações de onda para cada nível energético quantizado de um átomo, cada extrato apresentará sua própria equação de onda e esta descreverá sua energia e propriedades.

Contudo, mesmo com todo o avanço computacional das últimas décadas, apenas modelos simples, utilizando-se átomos de hidrogênio e hélio podem ser construídos matematicamente, devido ao número extremamente grande de variáveis envolvidas, limitando assim a utilização da física quântica para a simulação e identificação de propriedades em átomos e moléculas.

No átomo de hélio um dos problemas é o cálculo da reação de repulsão entre seus dois elétrons na camada de valência. Uma solução para este problema foi introduzida em 1927 pelo Dr. Douglas Hartree e é conhecida pelo nome de método Hartree Fock, que preconiza que uma aproximação da função de onda real é proposta, utilizando-se alguns artifícios matemáticos. Mesmo com toda a evolução nos métodos e aproximações, pouca coisa avançou em relação a utilização destes cálculos para moléculas complexas.

Já em 1964 uma outra solução foi apresentada através dos estudos de Pierre Hohenberg e Walter Kohn. Em sua tese foi provado que toda a informação que um sistema atômico possui está contida em sua densidade eletrônica e como a função da densidade é muito mais simples de ser calculada, ocorreu uma verdadeira revolução no campo da simulação matemática de partículas.

2. METODOLOGIA

Devido a escassez de literatura em língua portuguesa, este campo da ciência acaba por ser pouco estudado em nosso país. O presente trabalho foi desenvolvido como uma apresentação simples e didática dos métodos científicos que possibilitam o estudo e desenvolvimento de análises computacionais em partículas atômicas e, em especial, a Teoria dos Funcionais da Densidade.

Foram estudados diversas fontes, tanto na área matemática quanto nas áreas práticas de cada base teórica a ser explanada. No entanto não é objetivo deste o aprofundamento nestes tópicos, posto que servem apenas de ferramenta para o desenvolvimento e comprovação dos postulados. Serão apresentados os modelos básicos utilizando a equação de Shrodinger para os átomos de hidrogênio e hélio quando os componentes da equação de onda serão explicados. O método de Born-Openheimer que divide o movimento do núcleo e dos elétrons em duas funções, uma vibracional e outra rotacional, será apresentado de forma sucinta e servirá de base para o entendimento das teorias subsequentes.

Finalmente na impossibilidade de uma aplicação real destes métodos para sistemas complexos, será apresentada a solução de Kohl e Hohemberg, com a revolucionária introdução dos funcionais da densidade como portadores das características do sistema estudado.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Devido à vasta base teórica para a implementação dos ensaios computacionais e a alta complexidade requerida pra tal, há a necessidade de uma maior imersão neste campo, para que pesquisas práticas possam ser apresentadas. Entretanto, o desenvolvimento realizado até o momento já é suficiente para uma apresentação e divulgação para a Comunidade Acadêmica.

Este tipo de ciência, devido às barreiras anteriormente expostas, é bastante desconhecida e por se tratar de um campo extremamente vasto necessita de um grande numero de apoiadores e pesquisadores.

Ocorre que estudos recentes, neste mesmo ramo teórico, obtiveram resultados bastante positivos na área de baterias de longa duração para equipamentos eletrônicos móveis, demonstrando, assim, a abrangência irrestrita que tal campo possui para os avanços tecnológicos modernos.

A utilização deste tipo de conhecimento pode ser ótima aliada no desenvolvimento de uma grande quantidade de resultados em um pequeno período de tempo. Na Universidade americana MIT, cerca de 15.000 estruturas atômicas foram processadas e em 6 meses tiveram seus resultados apresentados, mediante utililização de simulações, porém o mesmo estudo, caso fosse conduzido pela escola tradicional, teria sido impossível de ser realizado.

4. CONCLUSÕES

Assim como a física clássica deu espaço para a física quântica, as pesquisas práticas, cada vez mais, serão substituídas ou complementadas pelas simulações computacionais.

Existe uma grande barreira entre o pesquisador e este tipo de ciência e isto é um fator limitante, tanto na apresentação de resultados como na explicação de fenômenos desconhecidos.

Esses estudos, embora distantes de nossa formação acadêmica, deveriam receber mais atenção dos órgãos de ensino, visto que a ciência moderna está cada vez mais complexa e as propriedades dos materiais e soluções estão sendo estudadas ao limite. Casos extremos, como fases meta estáveis por exemplo, são muito difíceis de serem estudados pelas abordagens tradicionais mas podem ter suas características bastante aprofundadas por uma abordagem utilizando TFD.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Livro

LEVINE, Ira. **Quantum Chemistry 7Th Ed.** New York: Pearson, 2013.

MCMAHON, D. **Quantum Mechanics Demystified 1st Ed.** Chicago: Mcgraw-Hill, 2006.

ALBERT, D. **Quantum Mechanics and Experience.** Massachusetts: Harvard University Press, 1992.

Documentos eletrônicos

MIT. **3.320.** MIT OCW, Cambridge MA, Primavera 2005. Acessado em 20 Jul. 2016. Online. Disponível em: <http://ocw.mit.edu/courses/materials-science-and-engineering/3-320-atomistic-computer-modeling-of-materials-sma-5107-spring-2005/>