

Simulação de Propriedades Físicas de Materiais Reais por primeiros princípios

Friday, 2 December 2016 16:55 (15 minutes)

Os recentes avanços em instrumentação científica possibilitaram a investigação de novas propriedades físicas, dentre as quais muitas foram previstas teoricamente a cerca de 30 anos. Medidas captam a resposta física de uma região macroscópica de uma amostra à uma dada perturbação (sonda). Além disso, amostras estão longe de nossa descrição ideais do sistema. Todos estes fatores contribuem para dificultar a interpretação e compreensão da física microscópica que gerou a resposta macroscópica do sistema em estudo. Por outro lado, em uma simulação computacional, temos total controle de nosso sistema ideal; o modelo teórico; que contém apenas as interações que julgamos importantes para seu estudo. A descrição das interações por primeiros princípios, em termos de átomos e elétrons interagentes e no formalismo da mecânica quântica, permite uma profunda compreensão da física microscópica de nosso sistema. Neste contexto, a simulação por primeiros princípios de materiais é uma poderosa técnica na compreensão de suas propriedades. Neste trabalho, apresentaremos brevemente algumas de nossas linhas de pesquisa em nanotecnologia sob a perspectiva da simulação computacional, utilizando a teoria do funcional da densidade.

Tipo de Apresentação

Oral

Primary author: LONGUINHOS, Raphael (Universidade Federal de Lavras)

Presenter: LONGUINHOS, Raphael (Universidade Federal de Lavras)

Session Classification: Comunicações Orais III