

TEORIA DO FUNCIONAL DA DENSIDADE APLICADO A FERRITA DE BISMUTO

XXXVIII Encontro de Iniciação Científica

Jesse de Oliveira Rodrigues Neto, Carlos William de Araujo Paschoal

A física da matéria condensada tem como foco principal o desenvolvimento e caracterização de materiais. Uma classe de materiais muito importantes são os multiferróicos, aqueles que possuem duas ou mais ordens ferróicas, pois esses possuem uma vasta gama de aplicações, por exemplo, dispositivos de armazenamento de dados e spintrônica. A Ferrita de Bismuto (BiFeO_3) é um dos multiferróicos mais estudados por apresentar magnetoeletricidade (ME), efeito de acoplamento entre as propriedades elétricas e magnéticas em temperatura ambiente. A Teoria do Funcional da Densidade (DFT) tem como motivação principal o mapeamento de um problema de muitos corpos para um sistema efetivo de uma única partícula que possua as mesmas características físicas do sistema original. Isso é feito promovendo a densidade eletrônica fundamental ao nível de observável principal do sistema. Neste trabalho será apresentada o DFT em seu aspecto teórico, partindo dos teoremas de Hohenberg-Kohn, passando pelo desenvolvimento das equações efetivas para uma partícula, que são as equações de Kohn-Sham (KS) e discutindo os tipos de funcionais de troca-correlação mais utilizados para realizar as aproximações do funcional da energia, e concluindo com as ferramentas necessárias para que o DFT seja aplicado computacionalmente. E, por fim, o DFT será utilizado para calcular a célula primitiva otimizada e a estrutura de bandas da Ferrita de Bismuto.

Palavras-chave: DFT. Ferrita de Bismuto. Estrutura de bandas. Funcional de Densidade.