RESUMO

AGUIAR, T.D. **Estudo Teórico das Excitações Eletrônicas Interbandas na Aproximação de Partícula Independente**. 2013. 100 p. Dissertação (mestrado) – Universidade Federal de São João del-Rei/Departamento de Ciências Naturais.

Neste trabalho, usando a Teoria do Funcional Densidade na Aproximação da Densidade Local (LDA), expansão da função de onda em ondas planas, e o método pseudopotencial, investigamos as propriedades eletrônicas e estruturais do GaN nas fases wurtzita e blenda de zinco, e do TiO2 nas estruturas anatase e rutila. Além disso, utilizando tanto o método *Random Phase Approximation* (RPA), como a Teoria do Funcional Densidade Dependente do Tempo (TDDFT), calculamos as partes reais e imaginárias da função dielétrica destes sistemas.

Na descrição do estado fundamental dos sistemas estudados, os valores obtidos para as propriedades estruturais, tais como os parâmetros de rede, “bulk modulus”, estão em boa concordância tanto com os dados experimentais, como com os outros resultados teóricos. Os resultados obtidos para a estrutura eletrônica do estado fundamental destes sistemas mostram que as energias dos estados de Kohn-Sham ocupados próximo ao nível de Fermi estão em boa concordância com os resultados teóricos conhecidos na literatura. Também mostram que o valor obtido para o “gap” destes materiais revelam um dos principais defeitos da aproximação LDA: os seus valores estão subestimados, como é bem conhecido na literatura.

Nos cálculos das partes real e imaginária da função dielétrica para os sistemas estudados usando tanto a aproximação RPA, como o método TDDFT, os valores obtidos para a contribuição eletrônica da constante dielétrica estática, estão em boa concordância tanto com os dados experimentais, como com outros resultados teóricos, sempre que esta comparação seja possível. Verificamos, também, que os resultados dos cálculos usando a TDDFT para estes sistemas mostram as mesmas características dos resultados usando o método RPA. Porém, a forma das curvas obtidas as respectivas partes real e imaginária da função dielétrica se assemelham melhor aos dados experimentais do que as obtidas com o método RPA.

No final, analisamos os problemas decorrentes tanto do uso da aproximação monoeletrônica, como do uso de funcionais puros para o termo de troca-correlação. No primeiro caso, um dos motivos pelo qual os resultados obtidos para o c-GaN foram bem ruins, é o fato de que, na descrição das excitações oriundas a partir de níveis de Fermi degenerados, a aproximação de partícula independente falha, pois para descrever uma excitação dupla e/ou tripla, precisaríamos usar de determinantes de Slater em que dois e/ou três elétrons são promovidos ao mesmo tempo para dois e/ou três estados desocupados, o que não está previsto na aproximação de partícula independente.

Palavras-chave: TDDFT, RPA, Propriedades ópticas, Primeiros Princípios, GaN, TiO2.