

DL 15.FEV2001*190867

FACULDADE DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA

UNIVERSIDADE DE COIMBRA

**Determinação das estruturas de equilíbrio
de agregados de átomos de lítio
numa parametrização de tight-binding**

Tese de Mestrado de MÁRIO RUI BACELAR

Orientador: Prof. Doutor Jorge M. Pacheco



Índice

Preâmbulo	4
1 Introdução	5
2 Teoria da funcional da densidade	8
3 A aproximação de tight-binding	13
4 Um modelo de tight-binding para o Li	21
5 Geometrias de equilíbrio de agregados de Li	28
6 Conclusões e trabalho futuro	41
Referências	43

Preâmbulo

Nesta tese foi desenvolvido um modelo semi-empírico de tight-binding, com o objectivo de ter uma “ferramenta” de fácil uso, para o estudo propriedades estruturais e electrónicas de agregados atómicos de lítio. Os parâmetros do modelo de tight-binding foram ajustados de forma a que o modelo reproduzisse energias e estruturas do estado fundamental de pequenos agregados de lítio com um número de átomos não superior a 10, obtidos no formalismo da teoria da funcional da densidade na aproximação da densidade local. O modelo foi depois usado na determinação de algumas propriedades associadas com as estruturas de equilíbrio de agregados de lítio, até Li_{40} , nomeadamente a determinação de estruturas de equilíbrio, e evolução com o tamanho da energia de ionização e da afinidade electrónica.

Referências

- [1] Vlasta B. Koucky, Piercarlo Fantucci, Jaroslav Koucky, Chem. Rev. 91, 1035-1108 (1991)
- [2] Dtanley Raimés, Many-Electron Theory (North-Holland Publishing Company, (1972)
- [3] Mathias Brack, Rev. Modern Phys. 65, 3 (1993)
- [4] W Matthew C. Foulkes, Roger Haydock, Phys. Rev. B 39, 17 (1989)
- [5] N Troullier and José Luís Martins, Phys. Rev. B 43, 1993 (1991)
- [6] Otto F. Sankey, David J. Niklewski, Phys. Rev. B 40, 6 (1989)
- [7] M. W. Finnis, A. T. Paxton, D. G. Pettifor, A. P. Sutton, Y. Ohta, Philosophical Magazine A 58 ,1 (1988)
- [8] D. W. Bullett, Solid State Phys., Vol 35 (1980)
- [9] C. H. Xu, C.Z. Wang, C.T. Chan, K.M. Ho, J. Phys. Condens Matter 4, 6047-6054 (1992)
- [10] Romuald Poteau, Fernand Spiegelmann, Phys. Rev. B, Vol 45, 4 (1992)
- [11] Romuald Poteau, Fernand Spiegelmann and Pierre Labastie, Z. Phys. D 30, 57 (1994)
- [12] J. C. Slater and G. F. Koster, Phys. Rev. 94,1498 (1954)
- [13] W. A. Harrison, Electronic Structure And Properties Of Solids (Freeman 1980)
- [14] L. Goodwin, A.J. Skinner, D.G. Pettifor, Europhys. Lett. 9(7), 701 (1989)
- [15] M.S. Tang, C.Z. Wang, C.T. Chan, K.M. Ho, Phys. Rev. B 53, 3 (1996)
- [16] David Tománek and Michael A. Schluter, Phys. Rev. Lett. 67, 2331 (1991)
- [17] Nicholas Metropolis Et Al, Journal Of Chemical Physics 21, 6 (1953)
- [18] Harold Szu, Ralph Martlei, Phys. Lett. A, Vol 122, 3 (1987)
- [19] R.S.Judson, M. E. Colvin, J. C. Meza, A. Huffer, D. Gutierrez, Int Journal Of Quantum Chemistry 44, 277 (1992)
- [20] Yongliang Xiao, Donald E. Williams, Chemical Physics Letters 215, 17 (1993)
- [21] D.E. Goldberg, Genetic Algorithms In Search, Optimization And Machine Learning (Addison-Wesley, 1989)
- [22] D.M. Deaven, K.M. Ho, Phys. Rev. Lett. 75, 2 (1995)
- [23] Ursula Rothlisberger, Wanda Andreoni, Journal Chem. Phys 94,8129 (1991)
- [24] George F. Bertsch et all, phys. Rev. lett. 67, 2690 (1991)

