

Electronic Structure Calculations, density functional theory and algorithms

Juliano de Bem Francisco*

*UFSC, Florianópolis

Resumo

O problema do cálculo de estruturas eletrônicas de átomos e moléculas é um importante problema da química teórica e vem cada vez mais se destacando no meio científico, sobretudo pelas aplicações nas indústrias e pelos desafios computacionais que surgem na sua formulação matemática. Nesta palestra apresentaremos as equações que descrevem o problema, denominadas de equações de Khon-Sham, e mostraremos suas relações com as condições de otimalidade de um conhecido problema de programação não linear. O objetivo é apresentar as peculiaridades do problema de modo que matemáticos aplicados interessados no tema possam nortear suas pesquisas sem mesmo conhecer com detalhes o problema físico. Falaremos ainda de alguns esquemas computacionais e de suas relações com métodos tradicionais de otimização.