

LOM3256 - Tópicos em Cálculo de Estrutura Eletrônica dos Materiais

Methods of electronic structure calculation of materials

Créditos-aula: 4

Créditos-trabalho: 0

Carga horária: 60 h

Ativação: 15/07/2015

Departamento: Engenharia de Materiais

Curso (semestre ideal): EF (7)

Objetivos

Propiciar ao aluno uma visão básica sobre os principais métodos de determinação teórica da estrutura eletrônica

dos materiais, com enfoque em sólidos cristalinos, mas também em materiais bidimensionais e nanoestruturados.

O principal método de cálculo a ser empregado no curso será a Teoria do Funcional da Densidade (Density Functional Theory, DFT), em algumas de suas muitas variantes. Ao final do curso, o aluno estará apto a

determinar propriedades dos materiais como estruturas de bandas, densidades de estados, superfícies de Fermi

e constantes elásticas, usando um ou mais dos métodos e códigos computacionais apresentados em aula.

Docente(s) Responsável(eis)

1176388 - Luiz Tadeu Fernandes Eleno

Programa resumido

Revisão de mecânica quântica; Revisão de física do estado sólido; Método de Hartree-Fock; Teoria do funcional da densidade; Métodos de ondas planas e pseudo-potenciais; Códigos computacionais

Programa

Revisão de mecânica quântica

- o Equação de Schrödinger

- o Átomo do hidrogênio e orbitais atômicos

- o Notação de Dirac

- o Princípio variacional

- o Combinação linear de orbitais atômicos

Revisão de física do estado sólido

- o Espaço direto e recíproco

- o Teorema de Bloch

- o Zona de Brillouin

- o Bandas de energia e densidade de estados

- o Energia de Fermi e superfície de Fermi

- o Aproximação de elétrons livres

Método de Hartree-Fock
o Determinantes de Slater
o Equação de Hartree-Fock
o Potencial de troca e correlação
o Algoritmo autoconsistente
Teoria do funcional da densidade
o Teoremas de Hohenberg-Kohn
o Equações de Kohn-Sham
o Funcionais de troca e correlação: LDA, GGA, etc.
Métodos de ondas planas e pseudo-potenciais
o Bases de ondas planas
o Pseudo-potenciais
o Bases de ondas planas aumentadas e linearizadas
o Método FP-LAPW
Códigos computacionais
o Quantum Espresso
o Elk
o Wien2k
o VASP

Avaliação

Método: Aulas expositivas, trabalhos e exercícios comentados.

Critério: Média aritmética de trabalhos propostos ao longo do curso.

Norma de recuperação: Não haverá exame de recuperação

Bibliografia

GRIFFITHS, D. J., Mecânica Quântica, Pearson.
ASHCROFT, N. W. Solid State Physics, Saunders College.
KITTEL, C. Introduction to Solid State Physics. John Wiley & Sons.
SUTTON, A. P. Electronic Structure of Materials, Oxford.
MORGON, N. H. e COUTINHO, K. (eds), Métodos de Química teórica e modelagem molecular, Livraria da Física Editora.
VIANNA, J. D. M., FAZZIO, A., CANUTO, S., Teoria Quântica de moléculas e sólidos, Livraria da Física Editora.
COTTENIER, S. Density Functional Theory and the Family of (L)APW-methods: a step-by-step introduction (apostila, disponível online)
THIJSEN, J. M. Computational Physics, Cambridge.
TADMOR, E. B., MILLER, R. E. Modeling Materials Continuum, atomistic and multiscale techniques, Cambridge.

Requisitos

LOM3215 - Física do Estado Sólido (Requisito)