

# LOM3256 - Tópicos em Cálculo de Estrutura Eletrônica

## Methods of electronic structure calculation

Créditos-aula: 4

Créditos-trabalho: 0

Carga horária: 60 h

Ativação: 01/01/2023

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.

*Provide the student with a basic view of the main methods of theoretical determination of the electronic structure, focusing on crystalline solids, but also on molecules, two-dimensional materials and nanostructured materials. The main calculation method to be used in the course will be the Density Functional Theory (DFT), in some of its many variants. At the end of the course, the student will be able to determine material properties such as band structures, densities of states, elastic constants, and Fermi surfaces, using one or more of the methods and computer codes presented in class.*

## 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

*Review of Quantum Mechanics; Review of Solid State Physics; Hartree-Fock Method; Density Functional Theory; Plane and pseudopotential wave methods; computer codes*

## Programa

Revisão de mecânica quântica Equação de Schrödinger Átomo do hidrogênio e orbitais atômicos Notação de Dirac Princípio variacional Combinação linear de orbitais atômicos Revisão de física do estado sólido Espaço direto e recíproco Teorema de Bloch Zona de Brillouin Bandas de energia e densidade de estados Energia de Fermi e superfície de Fermi Aproximação de elétrons livres Método de Hartree-Fock Determinantes de Slater Equação de Hartree-Fock Potencial de troca e correlação Algoritmo autoconsistente Teoria do funcional da

densidade Teoremas de Hohenberg-Kohn Equações de Kohn-Sham Funcionais de troca e correlação: LDA, GGA, etc. Métodos de ondas planas e pseudo-potenciais Bases de ondas planas Pseudo-potenciais Bases de ondas planas aumentadas e linearizadas Método FP-LAPW Códigos computacionais Quantum Espresso Elko Wien2k VASP

• *Review of quantum mechanics: Schrödinger's equation; Hydrogen atom and atomic orbitals; Dirac notation; Variational principle; Linear combination of atomic orbitals.* • *Solid state physics review: Direct and reciprocal space; Bloch's Theorem; Brillouin zone; Energy bands and density of states; Fermi energy and Fermi surface; Free electrons Approximation.* • *Hartree-Fock method: Slater determinants; Hartree-Fock equation; Exchange and correlation potential; Self-consistent algorithm.* • *Density functional theory: Hohenberg-Kohn theorems; Kohn-Sham equations; Exchange and correlation functionals: LDA, GGA, etc.* • *Plane and pseudopotential wave methods: Plane wave bases; Pseudo-potentials;* • *Augmented and linearized plane wave bases: FP-LAPW method.* • *Computer codes: NWCHEM, Quantum Espresso, , Wien2k, exciting, VASP, etc.*

## 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

LOM3226 - Mecânica Quântica (Requisito)