

# 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)