

# 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 Functionais 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)