# LOM3256 - Tópicos em Cálculo de Estrutura Eletrônica dos Materiais

### Methods of electronic structure calculation of materials

1. 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)  
THIJSSEN, 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)