



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DE OURO PRETO
REITORIA
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS E BIOLÓGICAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA



Nome do Componente Curricular em português: Estrutura Eletrônica de Átomos, Moléculas e Sólidos		Código: FIS129
Nome do Componente Curricular em inglês: Electronic Structure of Atoms, Molecules and Solids		
Nome e sigla do departamento: Departamento de Física - DEFIS		Aprovada em 06/10/2020 DECISÃO ADDEFIS N°. 24/2020 Art. 1º
Unidade acadêmica: Instituto de Ciências Exatas e Biológicas - ICEB		
Carga horária semestral	Carga horária semanal teórica	Carga horária semanal prática
60 horas	03 horas/aula	01 horas/aula
<p>Ementa: Métodos Hartree, Hartree-Fock e pós Hartree-Fock. Método Tight-Binding. Teoria do Funcional da Densidade. Aplicações dos métodos nos cálculos de propriedades de átomos, moléculas e sólidos. Simulação Computacional Voltada ao Cálculo de Estrutura Eletrônica.</p>		
<p>Conteúdo programático:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Revisão átomo de Hidrogênio. Métodos de Hartree, Hartree-Fock, estrutura eletrônica de átomos, moléculas e sólidos periódicos. 2. Teoria de Pseudopotencial. Construção de pseudopotenciais. Pseudopotenciais de norma conservada, Transferibilidade e dureza, Pseudopotenciais Ultrasoft. 3. Determinação de estrutura eletrônica. Teoria do funcional da Densidade. Orbitais localizados, LCAO, Método tight-binding, ondas planas. 4. Aplicações: estrutura de bandas dos cristais, defeitos, superfícies e interfaces, nanotubos, materiais bidimensionais. 5. Parte Prática. Simulação computacional com programas SIESTA, Quantum Espresso, ORCA. 		
<p>Bibliografia básica: indicar no mínimo três e no máximo cinco obras, de acordo com os livros que estão na biblioteca da unidade.</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Teoria quântica de moléculas e sólidos. J. D. M. VIANNA; A. FAZZIO e S. CANUTO 2. Electronic structure: basic theory and practical methods. R. M. MARTIN 3. Modern Quantum Chemistry: Introduction to advanced electronic structure theory. A. SZABO e N. S. OSTLUND 4. Fundamentals of Condensed Matter Physics, Marvin L. Cohen e Steven G. Louie 5. Electronic Structure Calculations for Solids and Molecules: Theory and Computational Methods. J. Kohanoff 		
<p>Bibliografia complementar: indicar no mínimo cinco e no máximo sete obras, de acordo com os livros que estão na biblioteca da unidade.</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Density-functional theory of atoms and molecules. Robert G. Parr e Yang Weitao 2. Quantum Chemistry. I. N. Levine; 3. Solid state physics. N. W. ASHCROFT e N. D. MERMIN 4. Introdução à física do estado sólido. Charles KITTEL 5. Molecular Quantum Mechanics. P. W. Atkins e R. S. Friedman 6. Materials Modelling using Density Functional Theory - Properties and Predictions. Feliciano Giustino 7. Density functional theory : a practical introduction. David S. Sholl and Jan Steckel 		