

PLANO DE ENSINO

Disciplina:	Estrutura Eletrônica de Átomos, Moléculas e Sólidos	Código da disciplina:	FMT XXX
Créditos:	4	Período do curso:	Primeiro ou segundo
Professor:	Matheus J S Matos	e-mail:	matheusmatos@ufop.edu.br

Nº de aulas		Carga Horária Semestral		
Semanais	Semestral	Teórica	Prática	Total
4	60	48	24	72

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.

OBJETIVOS

Propiciar ao aluno uma visão básica sobre os principais métodos de determinação teórica da estrutura eletrônica de átomos, moléculas sólidos e de materiais como sólidos cristalinos, materiais bidimensionais, nanoestruturados e moléculas. Ao final do curso, espera-se que o aluno esteja apto a determinar propriedades dos materiais como estruturas de bandas, densidades de estados, constantes elásticas, espectros atômicos e moleculares, usando um ou mais dos métodos e códigos computacionais.

CALENDÁRIO

Agosto 2018 - Dezembro 2018

METODOLOGIA

Aulas teóricas expositivas e com utilização de datashow e aulas práticas voltadas para o aprendizado de utilização de softwares e ferramentas voltadas para os cálculos utilizando DFT utilizando computadores.

AVALIAÇÕES

A avaliação será realizada através de relatórios de resultados de atividades teórico-práticas desenvolvidas ao longo da disciplina e da avaliação de um projeto de pesquisa com um documento escrito na forma de artigo e apresentação de seminários. Também poderão ser utilizadas avaliações com provas.

BIBLIOGRAFIA

BIBLIOGRAFIA BÁSICA

1. MARTIN, R. M. **Electronic structure**: basic theory and practical methods. Cambridge: Cambridge University Press, 2004.
2. SZABO, A. e OSTLUND, N. S. **Modern Quantum Chemistry**: Introduction to advanced electronic structure theory. Nova Iorque: Dover, 1989.
3. VIANNA, J. D. M.; FAZZIO, A. e CANUTO, S. **Teoria quântica de moléculas e sólidos**. São Paulo: Ed. Livraria da Física, 2004.
4. Kohanoff, J. (2006). Frontmatter. In **Electronic Structure Calculations for Solids and Molecules: Theory and Computational Methods** (pp. I-Vi). Cambridge: Cambridge University Press.
5. Robert G. Parr, Yang Weitao, **Density-functional theory of atoms and molecules**, Oxford University Press; Clarendon Press, Year: 1994
6. Fundamentals of Condensed Matter Physics, Marvin L. Cohen (University of California, Berkeley), Steven G. Louie, University of California, Berkeley, Cambridge University Press, ISBN:Hardcover 9780521513319
7. Quantum Chemistry (6 er edition), I.N.Levine (Boston, Allyn and Bacon, 1983).

Universidade Federal de Ouro Preto
Instituto de Ciências Exatas e Biológicas
Departamento de Física
Programa de Pós-graduação em Ciências - Física de Materiais

BIBLIOGRAFIA COMPLEMENTAR

1. ASCHCROFT, N. W. e MERMIN, N. D. **Solid state physics**. Nova Iorque: Saunders College Publishing, 1976.
2. Physical Properties of Carbon Nanotubes, R Saito(University of Electro-Communications, Tokyo), G Dresselhaus(MIT,), and M S Dresselhaus(MIT,), Default Book Series. July 1998
3. Feliciano Giustino-Materials Modelling using Density Functional Theory - Properties and Predictions - Oxford University Press (2014)
4. Molecular Quantum Mechanics (3 rd edition) P.W.Atkins e R.S.Friedman (Oxford University 1997, 2001).
5. Introduction to Quantum Mechanics 2ed. David J. Griffiths.
6. Quantum Mechanics Vol. 1 e 2. Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, Franck Laloe.

Data: 06/07/2018

Assinatura do (s) Professor (es): _____

Assinatura do (a) Coordenador (a): _____

VAGAS POR TURMA

Total de alunos na disciplina: 15

Total de vagas isoladas: 5