



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
INSTITUTO DE FÍSICA
CURSO DE FÍSICA DE MATERIAIS - BACHARELADO



FICHA DE DISCIPLINA

DISCIPLINA: INTRODUÇÃO A ESTRUTURA ELETRÔNICA DE MATERIAIS

CÓDIGO:

UNIDADE ACADÊMICA: INSTITUTO DE FÍSICA

PERÍODO/SÉRIE:

**CH TOTAL
TEÓRICA:**

**CH TOTAL
PRÁTICA:**

CH TOTAL:

60

--

60

OBRIGATÓRIA: () **OPTATIVA:** (X)

OBS:

PRÉ-REQUISITOS: Mecânica Quântica II

CÓ-REQUISITOS:

OBJETIVOS

Compreender o estado da arte da pesquisa em estrutura eletrônica de materiais; reconhecer as aproximações e limitações das teorias relacionadas à essa área; relacionar o conhecimento envolvido nessa área com os das demais áreas da ciência; empregar métodos e técnicas da pesquisa em estrutura eletrônica de materiais; realizar alguns cálculos de estrutura eletrônica no estudo de sistemas simples.

EMENTA

1 – O Problema de Muitos Corpos; 2 – Sistema de Partículas Idênticas; 3 – Teoria de

DESCRIÇÃO DO PROGRAMA

500
Jen
Aprova
10/11

1. O PROBLEMA DE MUITOS CORPOS

- 1.1 Introdução
- 1.2 O átomo de hidrogênio e as unidades atômicas
- 1.2 Átomos multieletrônicos
- 1.3 O spin

2. SISTEMA DE PARTÍCULAS IDÊNTICAS

- 2.1 Propriedades de simetria das autofunções
- 2.2 O Princípio da Exclusão

3. TEORIA DE HARTEE-FOCK

- 3.1 Aproximação adiabática
- 3.2 Aproximação de partícula única
- 3.3 Teoria de Hartree
- 3.4 Teoria de Hartree-Fock
- 3.5 Aproximações para o Termo de Exchange
- 3.6 Método de Hartree-Fock Roothan
- 3.7 Teorema de Koopmans

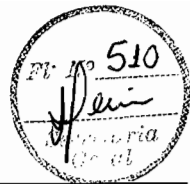
4. TEORIA DO FUNCIONAL DA DENSIDADE

- 4.1 Introdução
- 4.2 Gás de Elétrons Uniforme
- 4.3 Modelo de Thomas-Fermi
- 4.4 Teoremas de Hohenberg-Kohn
- 4.4 Equações de Kohn-Sham
- 4.5 Aproximação de densidade local (LDA)
- 4.5 Correção da auto-interação
- 4.6 Teorema de Hellman-Feynman na aproximação LDA

5. APROXIMAÇÃO DO PSEUDOPOTENCIAL

- 5.1 O Método das Ondas Planas
- 5.2 Conceito de Pseudopotencial
- 5.3 Pseudopotenciais locais e não locais
- 5.4 Bases Ondas Planas e pseudopotenciais
- 5.5 Geração de pseudopotenciais
- 5.6 Correção de caroço não linear
- 5.7 Energia total e forças

4



BIBLIOGRAFIA

- FAZZIO, A, *Estrutura Eletrônica de Materiais – Notas de Aula*, Ed. UFSM, Santa Maria, RS, 2001.
- GONIS, A., *Theoretical Material Sciences*, Material Research Society, Warrendale, USA, 2000.
- SRIVASTAVA, G. P., *Theoretical Modelling of Semiconductor Surfaces*, World Scientific, Londres, England, 1999.

APROVAÇÃO

14 / 12 / 2009

Universidade Federal de Uberlândia
Prof. Dr. Eduardo Kojy Takahashi
Coordenador do Curso de Física de Materiais
Portaria R nº 479/07

____ / ____ / ____

UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
Prof. Dr. Omar de Oliveira Diniz Neto
Diretor do Instituto de Física - INFIS
Portaria R nº 0420/05