



*Ementa de Tópicos Especiais: Introdução à Teoria do Funcional da Densidade*

**Código: FIS99916 – carga horária: 30h/aula – créditos: 02.**

1. **Fundamentos**
  1. Fundamentos da Mecânica Quântica.
  2. Sólidos como um sistema de muitos corpos.
  3. Aproximação do elétron independente.
  4. Sólidos e estrutura eletrônica: simetria.
2. **Teoria do Funcional da Densidade**
  1. Teoria de Thomas-Fermi
  2. Teoremas de Hohenberg-Kohn
  3. Equações de Kohn-Sham
  4. Funcionais locais
  5. Funções de base
  6. Métodos LAPW, PP e PAW
3. **Aspectos Práticos**
  1. Códigos computacionais que usam DFT
  2. Visão geral do Quantum Espresso
  3. Exemplos de cálculos de estrutura eletrônica
  4. Otimização estrutural de sólidos não magnéticos
  5. Propriedades magnéticas em DFT

**Bibliografia:**

1. Richard M. Martin, *Electronic Structure: basic theory and practical methods*, 2a ed. (Cambridge, Cambridge University Press, 2020). doi:10.1017/9781108555586.
2. J. Kohanoff. *Electronic Structure Calculations for Solids and Molecules: Theory and Computational Methods*. (Cambridge, Cambridge University Press, 2006). doi:10.1017/CBO9780511755613.
3. David S. Sholl, Janice A. Steckel, *Density Functional Theory: A practical introduction*. (John Wiley & Sons, 2009) doi: 10.1002/9780470447710.

Rio de Janeiro, 13 de janeiro de 2022.

\_\_\_\_\_  
\_\_\_\_\_  
Professor/matr.  
Coordenador/matr: