



UNIVERSIDADE DO ESTADO DO RIO DE JANEIRO
Centro de Tecnologia e Ciências
Instituto de Física Armando Dias Tavares
Programa de Pós-Graduação em Física

Ementa de Tópicos Especiais: Modelagem de moléculas e sólidos usando a Teoria do Funcional da Densidade

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

1. Funcionais de troca e correlação.
2. Pseudopotenciais.
3. Orbitais localizados e tight binding.
4. A molécula de hidrogênio.
5. O átomo de He.
6. Silício: hibridização s-p.
7. Grafeno (cones de Dirac).
8. Ferro bcc.
9. Cobalto hpc e fcc.
10. Gadolínio.
11. Cálculo de constantes elásticas

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.
4. Nguyen Tuan Hung, Ahmad R T Nugraha, Riichiro Saito. *Quantum Espresso Course for Solid-State Physics: A hands-on guide*. (New York, Jenny Stanford Publishing, 2022). doi: 10.1201/9781003290964.

Rio de Janeiro, 01 de fevereiro de 2024.

Professor/matr.
Coordenador/matr: